

SIMULATION NUMÉRIQUE DES PHÉNOMÈNES THERMIQUES ET MAGNÉTOHYDRODYNAMIQUES DANS UNE CELLULE DE HALL-HÉROULT

THÈSE N° 3185 (2005)

PRÉSENTÉE À LA FACULTÉ DES SCIENCES DE BASE

Institut d'analyse et de calcul scientifique

SECTION DE MATHÉMATIQUES

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES TECHNIQUES

PAR

Yasser SAFA

ingénieur civil diplômé de l'Université Libanaise, Beyrouth, Liban
DEA Modélisation et calcul intensif, Université Libanaise, Beyrouth, Liban
et de nationalité libanaise

acceptée sur proposition du jury:

Prof. J. Rappaz, directeur de thèse
Dr J. Antille, rapporteur
Dr M. Picasso, rapporteur
Dr M. Romero, rapporteur
Prof. R. Touzani, rapporteur

Lausanne, EPFL
2005

Version abrégée

Ce travail a pour objet la simulation numérique du comportement thermique d'une cellule d'électrolyse de l'aluminium. L'aluminium est produit par une réduction électrolytique de l'alumine dissout dans un bain formé principalement de cryolithe. Dans ce procédé de réduction, appelé procédé de Hall-Héroult, le métal est produit à une température d'environ 965 °C. Une couche de bain re-solidifié, appelée talus, se forme sur les parois de la cellule, protégeant celle-ci de la très forte agression chimique du bain. Les pertes thermiques à travers le talus et les parois jouent un rôle important dans le comportement magnétohydrodynamique et thermique de la cuve. Une connaissance précise de la forme des talus est de ce fait un ingrédient non négligeable dans le processus d'optimisation de la cellule.

Le champ des températures et la forme du talus sont obtenus en résolvant simultanément le système d'équations formé par: une équation non linéaire de convection-diffusion de la chaleur, qui peut être considérée comme un problème de Stéphan en enthalpie et température dans le domaine formé par les fluides et le talus, l'équation de Navier-Stokes avec une interface libre dans le domaine occupé par les fluides et les équations de Maxwell dans l'espace tout entier. Le terme source de l'équation de la chaleur provient de la dissipation par effet Joule de la chaleur produite par les courants qui traversent la cuve. Un schéma de Chernoff est utilisé pour la résolution numérique du problème de Stéphan.

Des résultats numériques 3D concernant la forme du talus, le potentiel électrique et les champs de température et de vitesse sont présentés.

Abstract

This work is concerned with a numerical simulation of the thermal behaviour of an electrolysis cell for the production of the aluminium.

Aluminium is produced by an electrolytic reduction of alumina dissolved in a bath of molten cryolite. In this reduction process, called Hall-Hérault process, the metal is produced at about 965 °C. A frozen bath layer, called ledge, arises in the boundary region and protects the side walls of the cell from corrosive electrolyte. This ledge may change the magneto-hydrodynamical equilibrium of the cell and reduce the heat loss through the walls. The ledge is thus playing a significant role in both the thermal and magnetohydrodynamical behaviour of the cell.

A precise knowledge of the ledge is thus an important ingredient in the optimization process of the cell.

The temperature field and the ledge shape in a whole smelter are obtained by simultaneously solving the system of equations formed by: a non-linear convection-diffusion heat equation, which can be considered as a Stephan problem in enthalpy and temperature in the domain of the cell occupied by fluids and ledge, Navier-Stokes equations with a free interface in the fluid domains and Maxwell equations in the whole space. The source term of the heat equation results from the Joule effect due to the electrical current crossing the cell. A Chernoff scheme is used to numerically solve Stephan problem.

Three dimensional numerical calculations showing ledge shape, temperature and velocity fields as well as electrical potential for an operating cell are obtained.

The effect of thermal field on the electrical current and the effect of fluid motions on the ledge shape in the aluminium cells are presented.

Remerciements

Ce travail est achevé dans une ambiance d'appui et de collaboration d'un certain nombre de personnes que j'aimerais remercier ici.

Je suis reconnaissant à mon directeur de thèse, le Professeur Jacques Rappaz, qui m'a accueilli dans son groupe et m'a stimulé dans la réalisation de cette recherche par ses précieux conseils, ses encouragements et ses critiques constructives.

Je souhaite également apporter mes vifs remerciements au Docteur Michel Flueck pour sa participation très importante tout au long de cette thèse.

Je remercie vivement le Docteur Michel V. Romerio pour m'avoir soutenu et conseillé dans ce travail.

Je tiens également à remercier le Docteur Jacques Antille, de l'industrie Alcan pour avoir suivi avec attention les développements pratiques de ce travail.

Je remercie aussi le Docteur Marco Picasso pour les intéressantes discussions et ses conseils avisés.

Je suis reconnaissant au Professeur Rachid Touzani de l'Université de Clermond-Ferrand, ainsi qu'aux Docteurs Jacques Antille, Marco Picasso et Michel V. Romerio d'avoir accepté de prendre le temps de lire ce travail et d'être membre de mon jury de thèse.

Mes remerciements s'adressent également au Professeur Thomas Mountford pour avoir présidé ce jury.

Je n'oublie pas de remercier Hicham Gebran et Ales Janka pour les nombreuses remarques et discussions qui m'ont été profitables.

Je remercie l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne pour m'avoir octroyé un poste d'assistant-doctorant, ainsi que le Fonds National pour la Recherche Scientifique, et l'industrie Alcan, pour avoir contribué au financement de ce travail.

Un grand merci, enfin, à mes parents, à Soumaïa, et à toute ma famille pour leur patience et le bonheur qu'ils m'apportent.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Processus d'électrolyse	2
1.1.1	L'anode	2
1.1.2	L'électrolyte	3
1.1.3	L'alumine	3
1.1.4	Le bloc cathodique	4
1.1.5	Les lignes de production	4
1.1.6	Cuve en opération	5
1.2	L'importance de l'étude thermique	6
1.2.1	Le rôle de l'effet Joule	6
1.2.2	Pertes thermiques et géométrie de la cuve	7
1.2.3	Les contraintes imposées sur l'isolation thermique	8
1.3	Principales contributions de ce travail au problème thermique	8
1.4	Planification du document	9
2	Modélisation	11
2.1	Hypothèses générales et géométrie du domaine	11
2.1.1	Hypothèses imposées au modèle	11
2.1.2	Description de la géométrie	13
2.2	Modélisation de l'électromagnétisme	14
2.2.1	Le problème électromagnétique stationnaire	15
2.2.2	Algorithme de résolution du problème électromagnétique	17
2.2.3	Formulation variationnelle du problème électromagnétique	17
2.3	Modélisation de l'hydrodynamique	18
2.3.1	Le problème HD stationnaire	19
2.3.2	Pénalisation de la condition "vitesse nulle" dans le domaine solide	19
2.3.3	Résolution itérative du problème HD linéarisé	20
2.3.4	Formulation variationnelle du problème HD	22
2.4	Modélisation de la thermique	23
2.4.1	Les lois de la thermique	23
2.4.2	Modélisation du problème du contact thermique	28
2.4.3	Discrétisation en temps du problème thermique	30
2.4.4	Formulation variationnelle du problème thermique	31
2.5	Ecriture du problème couplé	32

3	Méthodes et tests numériques	37
3.1	Les traitements numériques du problème thermique	37
3.1.1	Discrétisation spatiale de la formulation faible	37
3.1.2	Oscillations numériques et la méthode SUPG	40
3.2	L'équation matricielle du problème thermique	48
3.3	Validations numériques	53
4	Simulations numériques de problèmes industriels	61
4.1	Simulations du problème industriel sans couplage avec l'hydrodynamique .	61
4.1.1	Modèle de la tranche	61
4.1.2	Modèle d'une cuve prise dans son intégralité	75
4.2	Simulations du problème thermique couplé avec la MHD	85
4.2.1	Hypothèses du couplage MHD-Thermique	85
4.2.2	Comparaisons entre les calculs électro-thermique et MHD-Thermique	91
4.2.3	Effet de tourbillons hydrodynamiques sur le champ thermique	93
5	Conclusions et perspectives	97
A	Bibliographie	99
B	Principales notations utilisées	103

Chapitre 1

Introduction

L'aluminium, dont l'importance dans la métallurgie n'est plus à démontrer, est produit par réduction électrolytique. Le métal est obtenu à l'aide de deux processus distincts qui nécessitent tous deux l'emploi d'importantes quantités d'énergie.

Le premier consiste à extraire l'alumine de la bauxite, le second permet d'en extraire l'aluminium. La bauxite, minéral le plus abondant de l'écorce terrestre (8.1 %), tire son nom du village des Baux d'Arles (France) où elle fut découverte par Berthier en 1821. Elle contient trois hydroxydes d'aluminium, la gibbsite, la boehmite et le diaspore ainsi que du fer, de la silice et du titane. On y trouve également des impuretés sous forme de quartz, kaolinite, leucoxène et goethite...

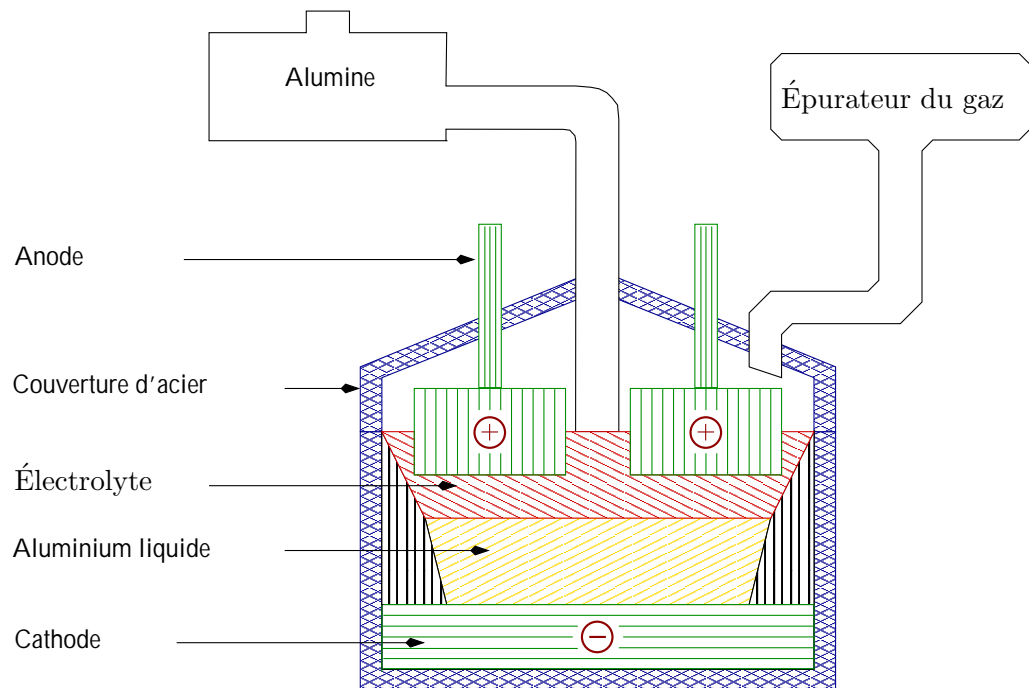


Figure 1.1: processus de Hall-Héroult.

Dans le premier processus l'oxyde d'aluminium est extrait de la bauxite à l'aide du procédé dit de Bayer qui opère à haute température et à pression élevée; il consiste à dissoudre les hydroxydes d'aluminium dans une solution caustique, à précipiter celle-ci puis à opérer une calcination permettant d'obtenir l'oxyde d'aluminium sous forme d'une poudre appelée alumine. Dans les paragraphes qui suivent nous nous inspirons de ([AEF01]) pour décrire le processus d'électrolyse.

1.1 Processus d'électrolyse

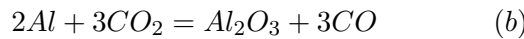
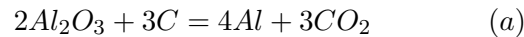
Industriellement l'aluminium est obtenu par réduction électrolytique de l'oxyde d'aluminium à l'aide d'un procédé inventé en 1886 indépendamment et simultanément par l'Américain Hall et le Français Héroult. Dans ce procédé, dit de Hall-Héroult (voit Figure 1.1), l'oxyde d'aluminium, présent sous forme d'alumine, est dissout dans un bain électrolytique formé typiquement d'alumine (5 %), de cryolithe Na_3AlF_6 (83 %), qui joue le rôle de solvant, et d'un mélange de sels fluorés, par exemple fluorure d'aluminium AlF_3 (7 %) et fluorure de calcium CaF_2 (5 %), dont la présence permet d'opérer à une température d'environ 960 °C, une température à laquelle la réduction est optimale de point de vue thermique.

Dans le procédé de Hall-Héroult les cuves modernes fonctionnent avec des anodes renouvelables en carbone. Ces dernières, qui sont partiellement immergées dans le bain électrolytique, sont consommées au cours de la réaction avec production de gaz carbonique.

L'aluminium, dont la densité est supérieure à celle du bain électrolytique, s'accumule au fond de la cuve, un fond constitué d'un bloc de carbone. Les parois de la cuve sont formées de matériaux réfractaires, thermiquement isolants, logés dans une armature d'acier.

Bien que le mot bloc cathodique désigne dans l'industrie le fond de carbone mentionné plus haut, la cathode proprement dite est constituée par la surface de séparation entre bain et aluminium.

L'ensemble des réactions chimiques qui conduit à la réduction de l'alumine peut être résumé par les deux équations suivantes:



La seconde équation décrit le phénomène de réoxydation, dite réaction de Boudouard, qui a lieu simultanément avec la réduction décrite par la première équation. Le taux de production de CO permet de mesurer le rendement Faraday de la réaction.

1.1.1 L'anode

L'anode est formée d'un mélange d'agréat de coke de pétrole, de goudron et de charbon, moulée en forme de blocs et traitée à 1100 °C dans des fours appropriés. Les anodes

sont fixées à la barre anodique à l'aide de tiges en aluminium ou en cuivre prolongées par des griffes en acier qui entrent dans la partie supérieure de celles-ci.

Les anodes doivent être remplacées à intervalles réguliers. Ce changement a lieu typiquement après un mois d'utilisation, lorsque l'anode n'a plus que le quart de son volume initial.

Des cuves modernes comptent entre 16 et 40 anodes. On constate qu'on aura ainsi grosso modo un changement d'anode par jour.

1.1.2 L'électrolyte

Puisqu'elle joue le rôle de solvant, la cryolithe est le composant principal de l'électrolyte. Mis à part des pertes très faibles provenant de l'évaporation de l'hydrolyse et d'infiltration dans le bloc cathodique, l'électrolyte n'est pas consommé durant le processus de réaction. Une cuve moderne contient typiquement entre 2 à 3 m^3 d'électrolyte, ce qui correspond à une hauteur du bain de l'ordre de 20 cm dans les canaux autour des anodes. En fonctionnement normal la température de l'électrolyte est comprise entre 955 et 965 °C.

Les autres constituants de l'électrolyte, principalement des sels fluorés, ont pour effet majeur d'abaisser la température à laquelle la réduction chimique a lieu. Cette diminution de la température conduit principalement à une réduction de la réaction de Boudouard.

La distance interpolaire i.e. la distance moyenne entre la face inférieure de l'anode et la surface de séparation entre l'aluminium et le bain électrolytique est typiquement de 2 à 10 cm.

Le courant électrique qui traverse l'électrolyte, dont la résistivité est de l'ordre de 10'000 fois supérieure à celle de l'aluminium, conduit à un important dégagement de chaleur par effet Joule. Le réglage des flux thermiques permet alors d'opérer dans la plage des températures mentionnées plus haut.

1.1.3 L'alumine

Conformément à la réaction donnée par (a) la production d'un kilo d'aluminium nécessite un montant d'alumine de 1.89 kg. Dans ce processus 0.33 kg de carbone sont consommés produisant 1.22 kg de gaz carbonique.

Alors que dans les anciennes cuves l'alimentation s'effectuait à intervalles de temps relativement longs impliquant l'introduction d'importantes quantités d'alumine, les cuves modernes sont équipées d'un dispositif, appelé point feeder, permettant une alimentation automatique. L'adjonction est de l'ordre de 1.5 kg d'alumine par minute. Notons que l'apport d'une importante quantité d'alumine peut conduire à la formation, sur le bloc cathodique, d'amas qui ne se dissolvent pas (sludge), le système des point feeders élimine cet inconvénient grâce à une dissolution rapide de l'alumine.

Lorsque la concentration d'alumine dans le bain devient trop faible c'est la cryolithe elle-même qui subit le processus de dissociation, avec formation de fluor. Ce fluor qui s'agglomère sous les anodes empêche le passage du courant électrique, provoquant une surtension, de l'ordre de 35 volts, désignée sous le nom d'effet anodique. L'augmentation de la température liée à cet effet peut conduire à une destruction partielle des anodes.

L'effet anodique est éliminé par une suppression mécanique de la couche de gaz qui recouvre la surface inférieure de l'anode.

1.1.4 Le bloc cathodique

Le bloc cathodique, souvent appelé cathode, est constitué de blocs de carbone obtenus par moulage d'un mélange d'anthracite et de graphite.

Des barres en acier, dites barres cathodiques, à travers lesquelles le courant électrique sort de la cuve sont insérées dans des rainures situées à la base inférieure du bloc cathodique ; elles y sont fixées par des tenons en acier ou par des pâtes à base de carbone permettant d'obtenir un bon contact électrique. Cet ensemble formé du bloc cathodique et des barres cathodiques repose sur des couches de matériaux réfractaires et isolants.

Les parois latérales en carbone sont fixées sur le bloc cathodique, le tout étant contenu dans un logement en acier de forme rectangulaire dont les dimensions sont typiquement de 9 à 14 m de longueur, 3 à 5 m de largeur et 1 à 1.5 m de profondeur. On notera que la profondeur de la partie opérationnelle de la cuve ne dépasse pas 50 cm.

Etant donné qu'aucun matériau connu ne résiste à l'effet corrosif de la cryolithe, il est nécessaire de recouvrir les parois de la cuve d'une couche protectrice formée de cryolithe solidifiée. L'épaisseur de cette couche, qu'on appelle talus, sera déterminée par l'isolation thermique de la cuve. On évitera que cette couche ne couvre la face supérieure du bloc cathodique afin de ne pas perturber la distribution des courants électriques.

Bien que la couche d'aluminium protège la cathode, de faibles infiltrations de sodium et de cryolithe pénètrent dans celle-ci. Elle doit de ce fait être périodiquement remplacée. Pour les cuves modernes le coût de ce regarnissage dépasse 15 % du coût de la cellule. La durée de vie d'une cathode est donc un facteur important dans le calcul du coût de la production.

Typiquement la vie moyenne d'une cathode pour des cuves modernes est de l'ordre de 5 à 8 ans. Il s'avère néanmoins que certaines cuves peuvent rester en fonctionnement jusqu'à 11 ans.

1.1.5 Les lignes de production

Dans l'industrie on utilise des dispositions en séries allant de 150 à 250 cuves où la cathode de l'une est électriquement connectée à l'anode de la suivante, pour former une ligne de cuves (ou potline). Cette connexion en série permet l'utilisation de redresseurs produisant des voltages élevés. Dans quelques cuves modernes ce voltage peut atteindre 1500 volts.

Les cuves, dont le courant peut aller de 175 KA à 325 KA, sont placées côte à côte (side by side). Ceci permet de réduire certains effets néfastes liés à la présence de champs magnétiques trop élevés. Les petites cuves ayant le courant inférieur à 50 KA, sont habituellement placées bout à bout (end to end).

Dans une cuve, la stabilité des mouvements dépend de façon prépondérante des forces de Laplace, forces qui proviennent de l'interaction entre les courants électriques qui traversent la cuve et les champs d'induction magnétiques générés par ces mêmes courants ou par ceux qui parcourent les barres omnibus (barres d'alimentation des courants). Le but

principal des arrangements dits “côte à côte” est d’obtenir, par un choix judicieux de la géométrie des conducteurs, une diminution de l’amplitude du champ d’induction.

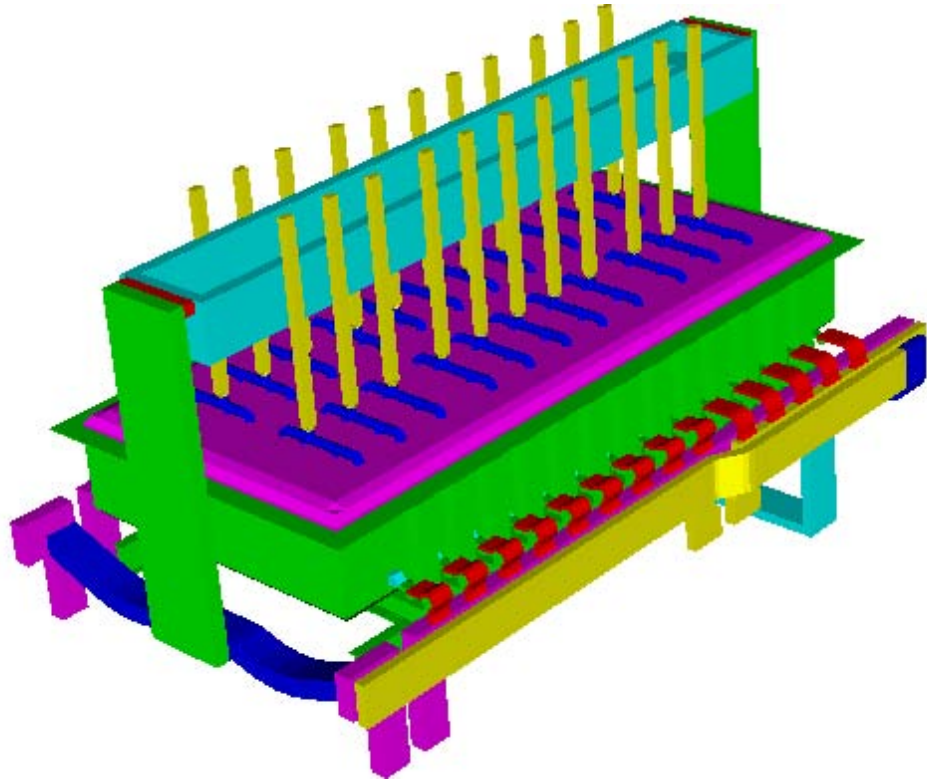


Figure 1.2: Un exemple de cuve.

1.1.6 Cuve en opération

Notre but, dans ce paragraphe, n’est pas de détailler les techniques de fonctionnement de la cuve, mais de présenter deux opérations principales ayant des effets directs sur la stabilité MHD i.e. magnétohydrodynamique et sur le comportement thermique de la cuve.

Les cuves alimentées automatiquement en alumine nécessitent deux opérations importantes effectuées fréquemment: changement d’anodes et le puisage du métal. Ces deux opérations qui ont lieu presque quotidiennement causent des perturbations dans le processus de production.

Le changement d’anodes induit les perturbations opérationnelles les plus grandes. Après un tel changement, une couche d’électrolyte se solidifie rapidement sous la nouvelle anode dont la température est plus basse que celle du bain. Cette couche persiste durant deux jours avant de disparaître par fusion, ce qui change localement la température de l’électrolyte, ceci est accentué par le fait que la nouvelle anode n’est parcourue que par de faibles

courants électriques. Un tel changement peut aussi perturber la distribution du courant anodique et ainsi déstabiliser le mouvement du fluide.

L'opération de puisage a un effet remarquable sur le champs thermo-électrique de la cuve. En effet le puisage diminue l'épaisseur de la couche de métal et augmente par conséquence la distance interpolaire ce qui conduit à une surtension électrique et un réchauffement dans la cuve. Face à cette opération perturbante, une autre opération est couramment effectuée. C'est le relèvement puis l'abaissement de la traverse supportant les anodes, avant et après le puisage, afin de maintenir constante la distance interpolaire nécessaire à la stabilité de la cuve. La consommation des anodes au cours du temps impose aussi d'abaisser la traverse vers la cathode pour maintenir une distance interpolaire constante. Cette opération a lieu toutes les deux ou trois semaines.

A mentionner que l'ajout de l'alumine dans la cuve peut aussi conduire à un changement thermique observé industriellement dans le bain, (voir [GrW87] page 227).

Au vu de ce qui précède, il est clair qu'un modèle thermique stationnaire représente l'état thermique en l'absence des perturbations opérationnelles mentionnées ci-dessus.

1.2 L'importance de l'étude thermique

Au cours de ces dernières décennies le coût de l'énergie électrique n'a cessé de croître. Cette réalité économique a conduit à introduire des changements dans les critères permettant de déterminer le rendement des cuves d'électrolyse. A côté du rendement Faraday il a fallu tenir compte en particulier du rendement énergétique. La perte d'énergie provenant des flux thermiques constitue l'un des facteurs importants qui entrent dans le calcul du rendement énergétique. Lorsqu'une réduction de l'énergie thermique produite peut être apportée, le design de la cuve doit être lui aussi modifié de manière à ce que les gains en énergie thermique ne conduisent pas à une diminution de la température; température à laquelle le rendement Faraday n'est plus optimal et où les talus peuvent commencer à fondre.

Dans les cuves modernes 20 % de l'énergie produite est utilisée pour maintenir cette température. L'énergie restante est partiellement utilisée pour porter l'alumine et les nouvelles anodes à la température du bain; elle est aussi partiellement dissipée par effet convectif ou radiatif à l'extérieur de la cuve.

1.2.1 Le rôle de l'effet Joule

La réduction des pertes thermiques peut être obtenue à l'aide d'une diminution de la distance interpolaire, i.e. la distance entre la face inférieure des anodes et la surface de séparation entre bain et aluminium, communément appelée interface. Il faut noter toutefois qu'une telle réduction ne peut prendre place sans risque d'affecter la stabilité magnétohydrodynamique du mouvement des fluides.

De manière plus précise, la très faible conductivité électrique du bain ($2.110^2 \text{ ohm}^{-1} \text{ m}^{-1}$), relativement à celle de l'aluminium ($3.310^6 \text{ ohm}^{-1} \text{ m}^{-1}$), implique que la majeure partie de la dissipation thermique, provenant de l'effet Joule, est générée dans celui-ci. Le paramètre

qui gouverne l'effet Joule est évidemment la densité de courant ou, à travers la loi d'Ohm, la tension entre anodes et cathode. Vu la remarque faite ci-dessus sur les conductivités électriques des deux fluides, le paramètre principal est donc la distance interpolaire.

Lorsque la distance interpolaire devient faible, de l'ordre de quelques centimètres, on devra s'assurer d'une part qu'aucune instabilité, générée au niveau de l'interface, ne conduise à un contact direct entre l'aluminium et les anodes et d'autre part que le rendement Faraday de la réaction de réduction ne diminue de façon significative.

Cette distance interpolaire demeure de ce fait un paramètre essentiel dans la conduite des cuves tant en ce qui concerne la conservation énergétique que la stabilité MHD.

1.2.2 Pertes thermiques et géométrie de la cuve

Au vu du rapport surface-volume d'une cuve, on se rend compte que les pertes thermiques seront d'autant plus faibles que la taille de la cuve sera plus grande. C'est cette remarque qui a motivé la construction de cuves de plus en plus grandes et donc d'ampérages de plus en plus élevés.

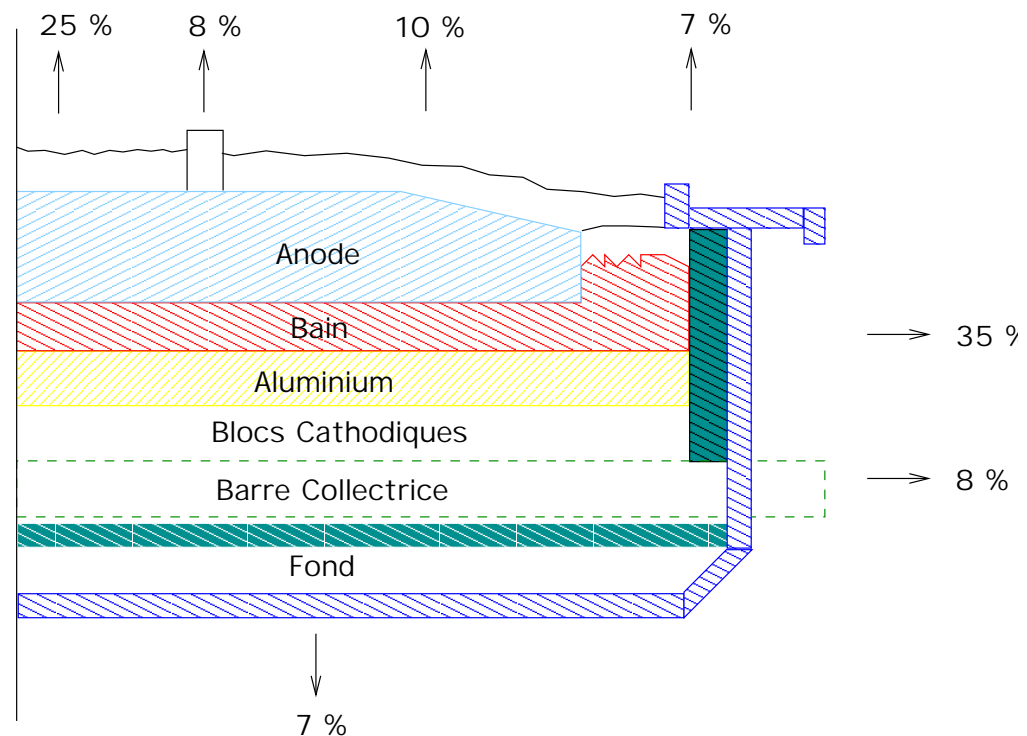


Figure 1.3: distribution de la perte thermique.

Comme le montre la Figure 1.3, 40 à 60 % des pertes thermiques prennent place dans la partie supérieure de la cuve, partie dans laquelle on trouve anodes, griffes et croûte. Des pertes thermiques relativement importantes ont lieu à travers les parois latérales, les barres collectrices et le fond de la cathode, (voir [KGH86] page 23).

1.2.3 Les contraintes imposées sur l'isolation thermique

Des progrès considérables visant à réduire les pertes thermiques ont été accomplis. Un design approprié permet en effet d'optimiser l'isolation thermique de la partie inférieure de la cathode et des parois latérales. Cette optimisation est évidemment effectuée en maintenant la température dans le bain et en assurant l'existence de flux thermiques adéquats, flux qui permettent de préserver, sur les parois latérales, une couche d'électrolyte solidifiée (talus). Pour les mêmes raisons la présence d'une couche isolante couvrant la périphérie externe de la cathode est également nécessaire. Celle-ci permet de minimiser, dans le métal liquide, la présence de courants horizontaux générateurs d'instabilités. Lorsque le fond de la cathode n'est pas suffisamment isolé, la température baisse, ce qui conduit à l'apparition d'une couche de bain solidifiée et, par voie de conséquence, aux courants horizontaux mentionnés ci-dessus.

1.3 Principales contributions de ce travail au problème thermique

Les développements effectués jusqu'ici dans l'étude de la stabilité MHD avaient pour objectif d'augmenter le courant et la taille des cuves. Dans les nouvelles cuves la géométrie et la position des barres omnibus sont optimisées, d'où l'importance d'une étude concernant la formation du talus solidifié. C'est l'étude de la solidification et de la forme de ce talus qui fait l'objet du présent travail.

L'usage de modèles mathématiques est devenu un outil indispensable dans le design et la construction des cuves. De puissants ordinateurs ont permis de déterminer, avec une bonne précision, l'équilibre thermique à partir de modèles permettant de présenter l'état stationnaire. Les frontières de la cuve étant données, nous déterminons les pertes thermiques en imposant l'équilibre des transferts de chaleur à travers ces frontières.

Notons que plusieurs auteurs se sont déjà intéressés à ce type de problème:

Maria Muniz, présente dans sa thèse [MMz95], une étude mathématique du front de solidification sous la forme d'un problème à frontière libre. Dans ce travail la forme du talus est déterminée dans une partie de la cellule d'électrolyse sous l'hypothèse que l'état est statique (pas de mouvement de fluide dans la cuve), que des conditions d'homogénéité par morceaux sont imposées, et qu'une condition est donnée sur la conductivité qui dépend, soit de la température, soit d'une variable spatiale. Au niveau théorique Muniz a démontré dans [MuC03] l'existence de la solution du problème électro-thermique dans un modèle stationnaire.

Des simulations numériques ont été effectuées par Marc Dupuis (Génisim) et Valdis Bojarevics (University of Greenwich) sur des modèles thermo-électriques et sur des modèles magnétohydrodynamiques (MHD) sans introduction d'un couplage MHD-thermique, (voir par exemple [COM03]).

Le centre universitaire polonais "Warsaw Technical University" a établi, en faisant l'usage,

du logiciel “ANSYS”, des résultats numériques relatifs au couplage thermo-électrique sur une partie de la cuve mais sans couplage avec la MHD.

L’étude du problème de la stabilité MHD fait l’objet d’une série d’articles par J. Descloux et M.V. Romerio à l’EPFL (voir par exemple [ROS86] et [DFR98]). Nous mentionnons que des calculs numériques relatifs au problème MHD sont effectués en utilisant le logiciel ALUCCELL développé par M. Flueck de l’EPFL en collaboration avec Alcan S.A.

Nos contributions prennent place dans deux directions distinctes:

- une direction concernant le couplage électro-thermique appliqué à une situation réelle, concernant une cuve prise dans son intégralité. Les résultats obtenus correspondent à ceux observés dans l’industrie.
- une direction concernant le couplage magnétohydrodynamique-thermique relatif à une situation réelle dans une cuve d’électrolyse.

1.4 Planification du document

Ce mémoire est composé de cinq chapitres.

A la suite de l’introduction, nous présentons au chapitre 2 les modèles électromagnétique, hydrodynamique et thermique. La notion de couplage entre ces trois problèmes y est développée. Dans le même chapitre, nous présentons également les aspects numériques permettant de résoudre le problème de la solidification dans une cuve d’électrolyse. Nous explicitons la discrétisation temporelle utilisée ainsi que les formulations variationnelles provenant des équations aux dérivées partielles.

Dans le chapitre 3 nous présentons des tests numériques permettant de valider le travail de programmation effectué.

Le chapitre 4 est consacré aux résultats obtenus pour le couplage électro-thermique dans un modèle de “tranche” de la cuve (Slice model). Des comparaisons avec d’autres résultats provenant de calculs effectués par le logiciel “ANSYS” sont ainsi proposées. Nous présentons d’autre part des résultats du couplage électro-thermique (sans calcul de la vitesse) appliqué à une situation réelle d’une cuve considérée dans son intégralité. Enfin, nous présentons des résultats de couplage MHD-Thermique (avec calcul de la vitesse) obtenus dans toute la cuve.

Le dernier chapitre contient la conclusion du présent travail. Il comprend, à la fois un résumé des principaux résultats obtenus, des améliorations pouvant être apportées au problème de solidification et des perspectives pour des développements futurs liés à la simulation numérique du couplage MHD-Thermique.

Chapitre 2

Modélisation

Dans ce chapitre nous présentons un modèle mathématique décrivant le phénomène de solidification dans une cellule de Hall-Héroult. Cette structure formelle permet, une fois connus le courant électrique et le champ de vitesse dans le bain, de détecter le profil selon lequel le talus se solidifie sur les bords internes de la cuve.

Ce chapitre s'articule de la façon suivante: dans la section 2.1, nous donnons les hypothèses imposées à notre modèle et la description géométrique du domaine, dans la section 2.2, nous exposons le modèle mathématique représentant les phénomènes électromagnétiques EM. Ce modèle est obtenu à partir des lois d'Ohm, d'Ampère et de Faraday. On déduit des équations ainsi obtenues une résolution du problème électromagnétique EM sous forme algorithmique. On tire alors du problème ainsi défini une formulation variationnelle. Dans la section 2.3, nous décrivons les phénomènes hydrodynamiques HD dans la cellule tout entière. La vitesse du fluide est pénalisée par l'introduction de la loi de Darcy dans la région correspondant à la partie solide. Dans la section 2.4, nous présentons le problème thermique Th. Finalement, dans la section 2.5, une discrétisation en temps du modèle électromagnétique, hydrodynamique, et thermique est présentée.

2.1 Hypothèses générales et géométrie du domaine

2.1.1 Hypothèses imposées au modèle

La solidification dans une cuve d'électrolyse de l'aluminium provient d'une interaction complexe entre plusieurs phénomènes physico-chimiques, qui donne lieu à un système dont la structure n'est pas encore complètement élucidée. A moins d'introduire des simplifications drastiques, les phénomènes électromagnétiques, hydrodynamiques et thermiques interagissent. Ces interactions sont illustrées schématiquement dans la Figure 2.1.

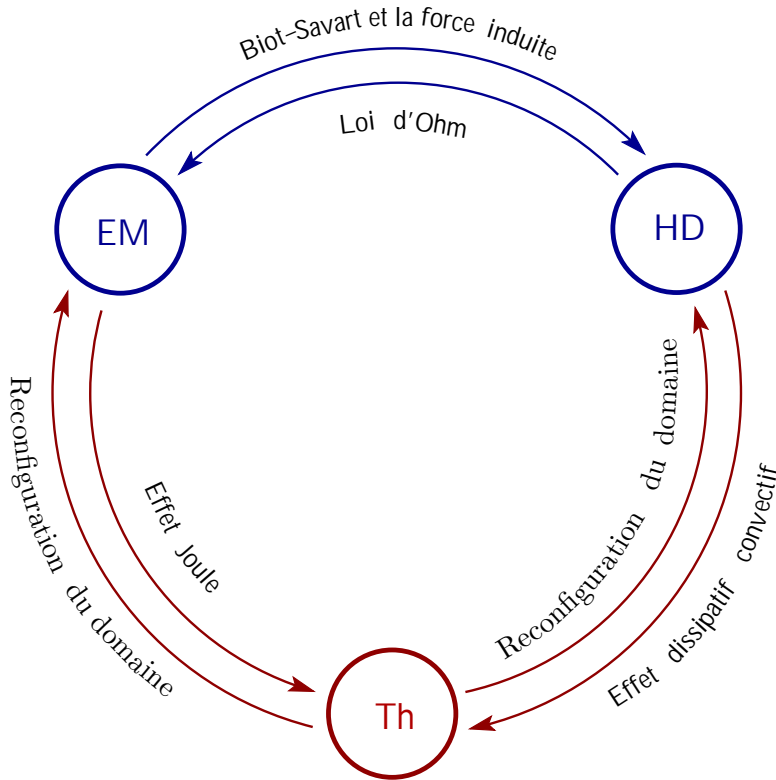


Figure 2.1: Schéma du couplage MHD-Thermique,
Th: thermique, HD: hydrodynamique, EM: électromagnétique.

Dans ce travail, nous avons considéré la formation du talus dans le bain liquide comme étant un phénomène de solidification thermique, couplé avec l'effet magnétohydrodynamique (MHD). Les contributions suivantes ne sont pas donc prises en compte dans notre travail:

Effet chimique: Ensemble des réactions chimiques qui peuvent modifier le champ de température, faire varier la conductivité thermique dans le bain à travers une modification de différentes concentrations, (voir [VEAJ 98]) et reconfigurer le diagramme de phases lié aux pourcentages des différentes composantes dans le mélange constituant le bain.

Effet Marangoni: C'est un effet thermocapillaire dû à la force du gradient thermique, qui peut conduire à un transport de particules du bain, puis à l'accumulation de celles-ci dans une zone du métal, (voir [SHD87] et [ASR01]). Sans tenir compte de cet effet, la solidification peut être considérée comme produite de la même façon, dans le métal et dans le bain.

Effet mécanique: Erosion subie par le talus solidifié, sous des contraintes de cisaillement.

Soulèvement gélif: La présence d'un gradient thermique provoque l'apparition d'un gra-

dient de potentiel attirant les solutions fluorées employées dans la cuve vers des zones du milieu poreux où les températures sont plus basses. Ces solutions peuvent alors s'infiltrer, par ségrégation, dans le talus solidifié et dans les blocs cathodiques, elles s'y cristallisent sous forme de gel. Il s'ensuit une dégradation dans le milieu de ségrégation sous l'effet des pressions générées; cette dégradation est connue sous le nom de soulèvement gélif (voir [RPE02]).

Dégagement des bulles gazeuses: Au cours de l'électrolyse on observe un dégagement de gaz au voisinage des anodes, l'échappement presque continu de bulles de gaz change les flux thermiques. Dans notre exposé, nous n'avons tenu compte que des phases solide, liquide et pâteuse dans le bain; la phase gazeuse a été négligée.

Comme en atteste la Figure 2.1, l'interaction entre les phénomènes électromagnétique (EM), hydrodynamique (HD) et thermique Th est complexe. Afin de simplifier la présentation du modèle, nous nous plaçons dans une situation où il y a découplage entre les trois phénomènes. Nous présentons les modèles décrivant chacun de ces problèmes en supposant connues les données relatives aux deux autres. Dans une phase ultérieure nous reprenons la situation couplée en établissant un algorithme de résolution du système mathématique qui découle de la forme de ces couplages.

2.1.2 Description de la géométrie

Nous décrivons dans ce paragraphe un dispositif général correspondant à notre situation. Pour représenter la cuve dans \mathbb{R}^3 , nous désignons par (e_x, e_y, e_z) le triplet orthonormé selon les axes Ox, Oy et Oz représentés dans la Figure 2.2.

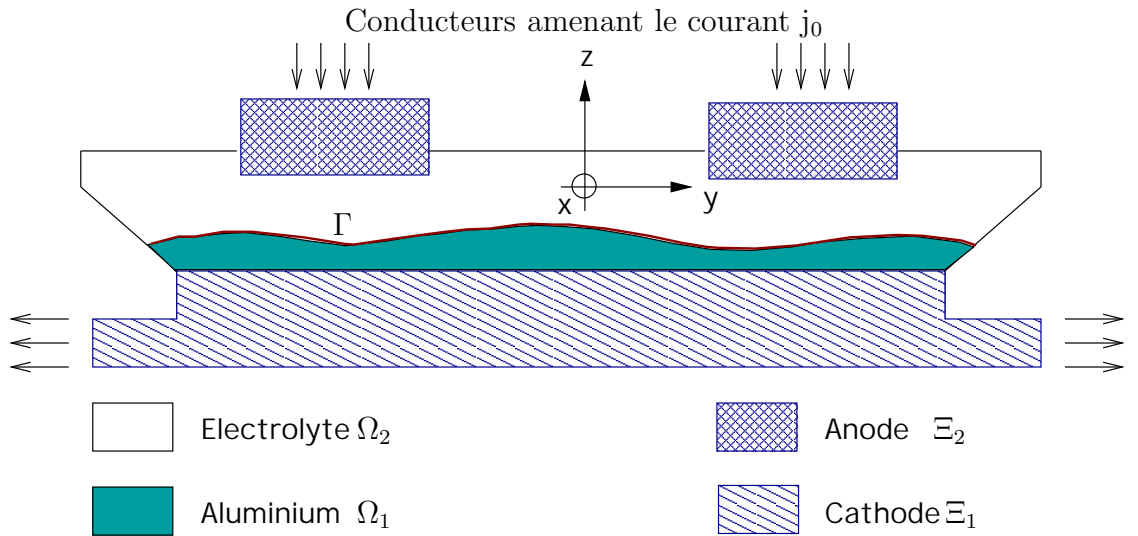


Figure 2.2: Coupe transversale d'une cuve.

Nous considérons les domaines ouverts suivants:

- Ω_1 : aluminium,
- Ω_2 : bain électrolytique,
- Ξ_1 : cathode,
- Ξ_2 : anode,

les adhérences de Ξ_1 et Ξ_2 étant disjointes i.e.:

$$\overline{\Xi}_1 \cap \overline{\Xi}_2 = \emptyset.$$

De même, nous notons:

- $\Omega = (\overline{\Omega}_1 \cup \overline{\Omega}_2)^\circ$: fluides,
- $\Xi = \overline{\Xi}_1 \cup \overline{\Xi}_2$: électrodes,
- $\Lambda = (\overline{\Omega} \cup \overline{\Xi})^\circ$: cellule d'électrolyse,

où $(.)^\circ$ signifie “l'intérieur” topologique. Nous considérons que la cellule d'électrolyse Λ est bien évidemment bornée et simplement connexe.

Nous définissons encore les grandeurs suivantes qui représentent les interfaces:

- $\Gamma = \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$: interface “aluminium-bain”,
- $S_i = \partial\Omega_i \cap \partial\Xi_i$ $i = 1, 2$: interface “cathode-aluminium” et “anode-bain”,
- $S = S_1 \cup S_2$: interface “électrodes-fluides”,
- $\Sigma_i = \partial\Lambda \cap \partial\Xi_i$ $i = 1, 2$: interface “cathode-extérieur” et “anode-extérieur”,
- $\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2$: interface électrodes-extérieur.

2.2 Modélisation de l'électromagnétisme

Dans cette section, nous présentons le modèle électromagnétique utilisé pour simuler les phénomènes électriques intervenant lors de l'électrolyse de l'aluminium. Nous considérons que la température, la vitesse et l'interface entre les deux fluides, aluminium et électrolyte, sont données. Nous établissons ensuite un modèle correspondant à l'état stationnaire d'une cuve, en nous basant sur un ensemble d'hypothèses classiques relatives aux conditions aux limites.

Hypothèses de modélisation:

La géométrie de la cellule d'électrolyse étant définie, nous supposons connus les domaines Ω_1 et Ω_2 et faisons les hypothèses suivantes:

Hypothèse 2.2.1: Les champs électromagnétiques satisfont les équations de Maxwell quasi-stationnaires dans tout l'espace \mathbb{R}^3 , la loi d'Ohm est supposée valable dans les conducteurs. Les effets dus aux variations de la perméabilité magnétique sont négligés.

Hypothèse 2.2.2: La densité de courant électrique j_0 circulant dans les conducteurs hors de la cellule est donnée; elle est appliquée à une partie de Σ et vérifie la relation:

$$\int_{\Sigma} (j_0, n) d\sigma = 0,$$

où n est la normale unité sur Σ orientée vers l'extérieur du domaine et (\cdot, \cdot) est le produit scalaire euclidien. De plus, nous faisons l'hypothèse qu'il n'y a pas de courant de surface.

Hypothèse 2.2.3: La conductivité électrique σ ne dépend que de la température θ dans chaque partie fluide du domain et dans les électrodes. Nous notons

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_i(\theta) & \text{dans } \Omega_i, \\ \tilde{\sigma}_i(\theta) & \text{dans } \Xi_i, \end{cases} \quad i = 1, 2. \quad (2.1)$$

2.2.1 Le problème électromagnétique stationnaire

Les hypothèses physiques sur lesquelles notre modèle repose ayant été établies, nous consacrons cette partie à la mise en équations de ce dernier.

Les champs intervenant dans la description du régime stationnaire sont:

- $u: \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$: vitesse des fluides supposée donnée,
- $b: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$: champs d'induction magnétique,
- $e: \overline{\Lambda} \rightarrow \mathbb{R}^3$: champ électrique,
- $j: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$: densité de courant électrique,
- $j_0: \overline{\Lambda}^c \rightarrow \mathbb{R}^3$: courant extérieur supposé connu,
- $b_0: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$: champs d'induction magnétique dû à j_0 :

$$b_0(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\overline{\Lambda}^c} \frac{j_0(\mathbf{y}) \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^3} d\mathbf{y} \quad \text{où } \mathbf{x} = (x, y, z), \quad (2.2)$$

où μ_0 est la perméabilité magnétique du vide.

– $\mathbf{j}_{int}: \bar{\Lambda} \rightarrow \mathbb{R}^3$: courant intérieur à calculer,

– $\mathbf{b}_{int}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$: champs d'induction magnétique dû à \mathbf{j}_{int} :

$$\mathbf{b}_{int}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Lambda} \frac{\mathbf{j}_{int}(\mathbf{y}) \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^3} d\mathbf{y} \quad \text{où } \mathbf{x} = (x, y, z). \quad (2.3)$$

Ainsi le champ d'induction \mathbf{b} et le courant \mathbf{j} sont donnés par:

$$\begin{aligned} \mathbf{b} &= \mathbf{b}_0 + \mathbf{b}_{int}, \\ \mathbf{j} &= \begin{cases} \mathbf{j}_0 & \text{sur } \bar{\Lambda}^c, \\ \mathbf{j}_{int} & \text{sur } \bar{\Lambda}. \end{cases} \end{aligned}$$

Pour obtenir les champs \mathbf{j}_{int} et \mathbf{b}_{int} nous tenons compte des relations suivantes:

$$\text{rot } \mathbf{e} = 0 \quad \text{dans } \Lambda, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{j} = \begin{cases} \sigma(\mathbf{e} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{b}) & \text{dans } \Omega_1 \cup \Omega_2, \\ \sigma \mathbf{e} & \text{dans } \Xi, \\ \mathbf{j}_0 & \text{dans } \bar{\Lambda}^c. \end{cases} \quad \begin{aligned} (2.5) \\ (2.6) \\ (2.7) \end{aligned}$$

Nous avons ainsi introduit la loi de Biot-Savart (2.2) – (2.3), la loi de Faraday (2.4) et la loi d'Ohm (2.5) – (2.7).

La loi d'Ampère $\text{rot} \mathbf{b}_{int} = \mu_0 \mathbf{j}_{int}$ implique:

$$\text{div } \mathbf{j}_{int} = 0 \quad \text{dans } \Lambda. \quad (2.8)$$

Suivant un procédé classique, on tire de l'équation (2.4) l'existence d'un potentiel scalaire $\phi: \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ permettant la description du champ \mathbf{e} :

Nous choisissons ϕ de sorte que:

$$\mathbf{e} = -\nabla \phi \quad \text{dans } \Lambda. \quad (2.9)$$

Suite à l'hypothèse que \mathbf{u} est nul sur S , nous définissons alors par continuité un prolongement $\tilde{\mathbf{u}}$ de \mathbf{u} dans Λ , avec $\tilde{\mathbf{u}} = 0$ dans $\Lambda \setminus \Omega$. Compte tenu de (2.5), (2.6), (2.7) et (2.9) nous obtenons la loi de conservation de la charge électrique suivante:

$$\text{div}(-\sigma \nabla \phi + \sigma \tilde{\mathbf{u}} \wedge \mathbf{b}) = 0 \quad \text{dans } \Lambda. \quad (2.10)$$

Nous introduisons les conditions de bord pour le potentiel électrique:

$$\begin{cases} -\sigma \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 & \text{sur } \partial \Lambda \setminus \Sigma, \\ -\sigma \frac{\partial \phi}{\partial n} = (j_0, n) & \text{sur } \Sigma_2, \\ \phi = 0 & \text{sur } \Sigma_1. \end{cases} \quad \begin{aligned} (2.11) \\ (2.12) \\ (2.13) \end{aligned}$$

Remarque 2.2.4 Le problème est formulé indépendamment de toute hypothèse sur la forme géométrique de la cuve.

2.2.2 Algorithme de résolution du problème électromagnétique

Il est à remarquer que l'induction \mathbf{b} dépend du courant \mathbf{j} donc du potentiel ϕ de façon implicite. Pour trouver ϕ nous utilisons donc un schéma itératif qui à l'étape m part d'une valeur ϕ^m et donne successivement la valeur \mathbf{b}^m calculée par la formule de Biot et Savart, puis la valeur ϕ^{m+1} obtenue en utilisant l'équation (2.10) avec les conditions aux limites (2.11)-(2.13).

On note \mathbf{b}^0 la valeur initiale de \mathbf{b} . Ensuite pour $m = 0, 1, 2, 3 \dots$

$$S_{EM} \left\{ \begin{array}{ll} \operatorname{div}(-\sigma \nabla \phi^{m+1} + \sigma \tilde{\mathbf{u}} \wedge \mathbf{b}^m) = 0 & \text{dans } \Lambda, \quad (2.14) \\ -\sigma \frac{\partial \phi^{m+1}}{\partial n} = 0 & \text{sur } \partial\Lambda \setminus \Sigma, \quad (2.15) \\ -\sigma \frac{\partial \phi^{m+1}}{\partial n} = (\mathbf{j}_0, \mathbf{n}) & \text{sur } \Sigma_2, \quad (2.16) \\ \phi^{m+1} = 0 & \text{sur } \Sigma_1, \quad (2.17) \\ \mathbf{j}_{int}^{m+1} = \sigma(-\nabla \phi^{m+1} + \tilde{\mathbf{u}} \wedge \mathbf{b}^m) & \text{dans } \Lambda, \quad (2.18) \\ \mathbf{b}^{m+1}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathbf{j}_{int}^{m+1}(\mathbf{y}) \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^3} d\mathbf{y} + \mathbf{b}_0(\mathbf{x}) & \forall \mathbf{x} \in \Lambda. \quad (2.19) \end{array} \right.$$

Le critère d'arrêt est basé sur la discrédance en norme L^2 du potentiel électrique.

2.2.3 Formulation variationnelle du problème électromagnétique

Dans le but de résoudre numériquement le problème S_{EM} , nous allons établir une formulation faible de ce problème. Afin d'obtenir une présentation plus claire et plus simple, nous introduisons les espaces de Sobolev usuels (pour les définitions et de plus amples informations sur les espaces de Sobolev utilisés, le lecteur pourra consulter [Ada75] ou [RT83]). Cette façon classique de procéder permet un passage immédiat à la formulation en éléments finis, méthode que nous avons choisie pour notre calcul numérique.

La formulation faible du problème s'obtient de manière standard en intégrant l'équation aux dérivées partielles (2.14) contre une fonction test et en effectuant des intégrations par parties en tenant compte des conditions au bord: (2.15) - (2.17).

On définit l'espace fonctionnel Y^{EM} :

$$Y^{EM} = \{\phi \in H^1(\Lambda); \phi = 0 \text{ sur } \Sigma_1\}$$

où H^1 est l'espace de Sobolev des fonctions qui sont, ainsi que leurs dérivées premières, dans $L^2(\Lambda)$.

Après avoir mis (2.14)-(2.17) sous forme variationnelle le problème S_{EM} devient:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \phi^{m+1} \in Y^{EM}, j_{int}^{m+1} \in (L^2(\Lambda))^3 \text{ et } b^{m+1} \in (H^1(\Lambda))^3, m = 0, 1, 2, \dots \\ \text{tels que:} \\ \int_{\Lambda} \sigma(\nabla \phi^{m+1}, \nabla v) d\mathbf{x} - \int_{\Lambda} \sigma(\tilde{\mathbf{u}} \wedge b^m, \nabla v) d\mathbf{x} = - \int_{\Sigma_2} (j_0, n) v d\Sigma \quad \forall v \in Y^{EM} \quad (2.20) \\ j_{int}^{m+1} = \sigma(-\nabla \phi^{m+1} + \tilde{\mathbf{u}} \wedge b^m) \quad \text{dans } \Lambda, \quad (2.21) \\ b^{m+1}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Lambda} \frac{j_{int}^{m+1}(\mathbf{y}) \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^3} d\mathbf{y} + b_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Lambda, \quad (2.22) \end{array} \right.$$

nous rappelons que b_0 est l'induction magnétique due au courant extérieur j_0 .

2.3 Modélisation de l'hydrodynamique

Dans cette section, nous présentons le modèle hydrodynamique stationnaire dans la cellule d'électrolyse. Nous considérons que l'induction magnétique b , la densité de courant électrique j et la température θ sont données. Nous établissons ensuite un modèle stationnaire correspondant à cette situation. Nous faisons l'hypothèse suivante:

Hypothèse 2.3.1: Soit $h : D \rightarrow \mathbb{R}^3$ la paramétrisation de l'interface libre $\Gamma(h)$ (interface aluminium-bain voir Figure 2.2) où D est un rectangle du plan (x, y) correspondant au fond du bain (interface aluminium-cathode). A noter que pour h donné, l'interface est définie par $\Gamma(h) = \{(x, y, z) : z = h(x, y), (x, y) \in D\}$ ceci implique en particulier que l'interface ne présentera aucune intersection double ou multiple avec une droite verticale. Désormais, nous rappellerons la dépendance de Ω_1 , Ω_2 et Γ par rapport à h en notant:

$$\Omega_i = \Omega_i(h), \quad i = 1, 2, \quad \Gamma = \Gamma(h).$$

Nous remarquerons enfin que:

$$\int_D h(x, y) dx dy = V_1,$$

où V_1 est le volume de l'aluminium.

Remarque 2.3.2: La normale unité extérieure à $\Omega_1(h)$ prise sur $\Gamma(h)$ est donnée par:

$$n = \frac{1}{\|\nabla(z - h)\|} \cdot \nabla(z - h).$$

Hypothèse 2.3.3: La densité ρ et la viscosité μ , sont supposées constantes sur chacune des parties de $\Omega_i, i = 1, 2$. Par contre la conductivité σ dépend de la température θ dans chaque partie du domaine, nous notons:

$$\rho = \rho_i, \quad \mu = \mu_i, \quad \sigma = \sigma_i(\theta) \quad \text{dans } \Omega_i(h), \quad i = 1, 2,$$

qui, dans ce paragraphe, sont des données.

Clairement la densité ρ_2 du bain est inférieure à la densité ρ_1 de l'aluminium ($\rho_2 < \rho_1$)

2.3.1 Le problème HD stationnaire

Nous consacrons cette partie à la mise en équations du modèle Hydrodynamique (HD). Les termes électromagnétiques: \mathbf{j} et \mathbf{b} étant donnés, les champs qui entrent dans la description du cas stationnaire sont:

- $\mathbf{u}: \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$: vitesse du fluide,
- $p: \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$: pression du fluide.

D’après les hypothèses (2.2.1), (2.2.2) et (2.2.3), ces inconnues sont régies par les équations de Navier-Stokes stationnaire suivantes:

$$\rho(\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u} - \operatorname{div} \left(2\mu \mathbb{D}(\mathbf{u}) - (p + \rho g z) \mathbb{I} \right) = \mathbf{j} \wedge \mathbf{b} \quad \text{dans } \Omega_1(h) \cup \Omega_2(h), \quad (2.23)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega_1(h) \cup \Omega_2(h), \quad (2.24)$$

$$(\mathbf{u}, \nabla(z - h)) = 0 \quad \text{sur } \Gamma(h), \quad (2.25)$$

$$\text{où } \mathbb{D}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T), \quad \mathbb{I} = (\delta_{ij})_{i,j} \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Nous avons ainsi introduit successivement dans ce système l’équation de conservation du moment (2.23), la condition d’incompressibilité (2.24), et la condition traduisant l’immiscibilité des deux fluides (2.25).

Des conditions classiques d’adhérence au bord et d’équilibre des forces sur $\Gamma(h)$ sont supposées satisfaites i. e.:

$$\mathbf{u} = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (2.26)$$

$$\{\mathbf{u}\}_{\Gamma(h)} = 0, \quad (2.27)$$

$$\{(-p\mathbb{I} + 2\mu\mathbb{D}(\mathbf{u}))\mathbf{n}\}_{\Gamma(h)} = 0, \quad (2.28)$$

$$\iint_D h(x, y) dx dy = V_1. \quad (2.29)$$

où $\{\cdot\}_{\Gamma(h)}$ dénote le saut à travers $\Gamma(h)$.

Notons que l’équation (2.29) revient à imposer la conservation de la masse des fluides puisque la densité est constante dans chacun d’eux.

2.3.2 Pénalisation de la condition “vitesse nulle” dans le domaine solide

Dû à certaines parties de la cuve dans lesquelles il y a eu solidification du bain ou d’aluminium (talus) régie par l’effet thermique (voir Figure 2.3), le domaine fluide est une inconnue du problème qui sera déterminée itérativement.

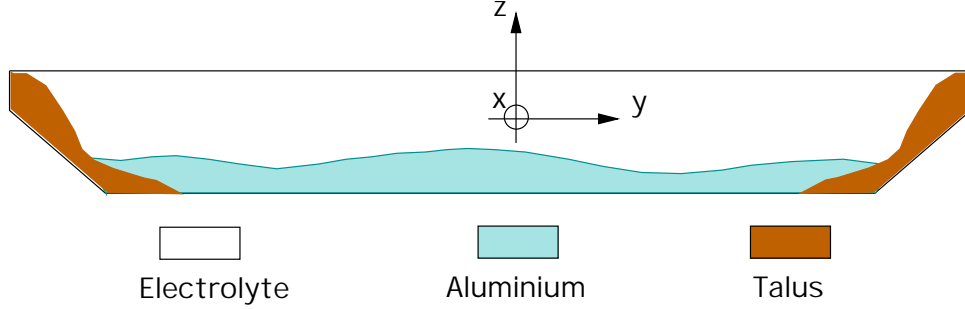


Figure 2.3: Le talus solidifié représenté dans une coupe transversale.

Ainsi nous nous intéressons à calculer les champs de vitesse et pression dans un domaine liquide qui évolue au cours des itérations. Une telle situation se rencontre non seulement dans le cas d'un fluide qui se solidifie ou d'un solide qui se liquéfie, mais également dans de nombreuses autres situations telles que celles d'un fluide contenu dans un récipient à parois mobiles ou d'un fluide contenant des corps solides libres. Les fluides pris en compte dans notre travail sont régis par des équations aux dérivées partielles définies dans des ouverts qui varient au cours des itérations. Ceci est à la base des difficultés tant théoriques que pratiques (voir P. Gremaud[GRE91]).

Pour palier cet inconvénient, nous faisons usage ici d'une méthode dite "du domaine auxiliaire". Cette méthode consiste à plonger le domaine de calcul dans un domaine plus grand, permettant ainsi, via une méthode de pénalisation, de se ramener à des calculs sur un domaine fixe. La vitesse et la pression sont alors définies même dans les zones solidifiées, donc dans tout $\Omega = (\overline{\Omega}_1 \cup \overline{\Omega}_2)^\circ$. Nous ajoutons de plus dans les équations de Navier-Stokes un terme $K(f_s)u$ dit de Carman Kozeny où f_s qui dépend de la température est la fraction solide. La fonction K est, selon la loi de Carman-Kozeny, donnée par:

$$K(f_s) = \frac{\mu C f_s^2}{P^2(1 - f_s)^3}$$

où P est la taille moyenne de la porosité et C est une constante obtenue expérimentalement. L'équation (2.23) prend alors la forme:

$$\rho(u, \nabla)u - \operatorname{div}(2\mu \mathbb{D}(u) - (p + \rho g z)\mathbb{I}) + Ku = j \wedge b \quad \text{dans } \Omega_1(h) \cup \Omega_2(h), \quad (2.30)$$

Dans la phase liquide $f_s = 0$ et $K = 0$ de sorte que l'équation ci-dessus se ramène à la forme usuelle de Navier-Stokes. Dans la zone pâteuse (mushy region), $0 < f_s < 1$, la valeur de K peut être nettement plus grande que celle des autres termes, de ce fait l'équation s'exprime dans ce cas, sous la forme de la loi de Darcy, donnée par:

$$\nabla(p + \rho g z) = -Ku + j \wedge b.$$

Lorsque f_s tend vers 1 (phase solide), $K(f_s)$ tend vers l'infini et on obtient $u = 0$.

2.3.3 Résolution itérative du problème HD linéarisé

La nonlinéarité de l'équation de Navier-Stokes contenue dans le terme $\rho(u, \nabla)u$ peut être traitée à l'aide de différentes méthodes. Dans notre cas nous proposons une linéarisation

Le problème HD est alors résolu de façon itérative en alternant les deux étapes suivantes:

- $$(u, n) = 0, \text{ sur } \Gamma(h)$$

Le problème ainsi obtenu se prête bien à une formulation variationnelle.

- $$\delta h = -\frac{\{((-p\mathbb{I} + 2\mu\mathbb{D}u)n, n)\}_{\Gamma(h)} + Cste}{\{(j \wedge b, e_z) - \rho g\}_{\Gamma(h)}}.$$

$$\iint_D \delta h(x,y) dx dy = 0.$$

Dans la suite on posera:

Ainsi le schéma itératif qui permet de calculer u^{m+1} , p^{m+1} , $Cste^{m+1}$, ψ^{m+1} et h^{m+1} en fonction des grandeurs calculées au pas d'itération m devient:

$$S_{HD} \left\{ \begin{array}{ll} \rho(u^m, \nabla) u^{m+1} - \operatorname{div} (2\mu \mathbb{D} u^{m+1} - (p^{m+1} + \rho g z) \mathbb{I}) \\ \qquad \qquad \qquad + K u^{m+1} = j \wedge b & \text{dans } \Omega_1(h^m) \cup \Omega_2(h^m), (2.31) \\ \operatorname{div} u^{m+1} = 0 & \text{dans } \Omega_1(h^m) \cup \Omega_2(h^m), (2.32) \\ (u^{m+1}, n) = 0 & \text{sur } \Gamma(h^m), (2.33) \\ \{((-p^{m+1} \mathbb{I} + 2\mu \mathbb{D} u^{m+1})n, t)\}_{\Gamma(h^m)} = 0 & \forall t \text{ tangente à } \Gamma(h^m), (2.34) \\ \psi^{m+1} = \{((-p^{m+1} \mathbb{I} + 2\mu \mathbb{D} u^{m+1})n, n)\}_{\Gamma(h^m)}, & (2.35) \\ h^{m+1} = h^m - \frac{\psi^{m+1} + Cste^{m+1}}{\{f_3\}_{\Gamma(h^m)}}, & (2.36) \\ \iint_D (h^{m+1} - h^m) dx dy = 0. & (2.37) \end{array} \right.$$

A noter qu'un critère d'arrêt a été introduit dans ce schéma. L'algorithme s'arrêtera lorsque la différence entre u^m et u^{m+1} , en norme $H^1(\Omega)$, devient inférieure à une "tolérance" $\varepsilon > 0$ choisie.

2.3.4 Formulation variationnelle du problème HD

En suivant les développements de la section précédente pour le système S_{EM} , nous allons établir de manière formelle une formulation faible pour le système S_{HD} . De manière standard, cette formulation s'obtient en intégrant chacune des équations aux dérivées partielles (2.31)-(2.32) contre une fonction test et en effectuant des intégrations par parties dans lesquelles les conditions de bord et d'interface (2.26)-(2.29) sont prises en compte. Procédant ainsi successivement nous obtenons la formulation faible suivante du problème S_{HD} :

soient Y^{HD} et $L_0^2(\Omega)$ les espaces définis par:

$$Y^{HD} = \{u \in (H^1(\Omega))^3; \text{ tel que: } u = 0 \text{ sur } \partial\Omega\},$$

$$\text{et } L_0^2(\Omega) = \{q \in (L^2(\Omega)); \text{ tel que: } \int_{\Omega} q d\mathbf{x} = 0\}, \text{ alors:}$$

étant donné $u^0 = u_0$, valeur initiale de la vitesse à l'itération $m = 0$, trouver $u^{m+1} \in Y^{HD}$, $p^{m+1} \in L_0^2(\Omega)$, ψ^{m+1} , $h^{m+1} \in L^2(\Gamma(h^m))$ et $Cste^{m+1} \in \mathbb{R}$, $m = 0, 1, 2, \dots$ tels que:

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{\Omega(h^m)} \rho((u^m, \nabla)u^{m+1}, w) d\mathbf{x} + 2\mu \int_{\Omega(h^m)} \mathbb{D}u^{m+1} : \mathbb{D}w d\mathbf{x} - \int_{\Omega(h^m)} p^{m+1} \nabla \cdot w d\mathbf{x} \\ & + \int_{\Omega(h^m)} K(u^{m+1}, w) d\mathbf{x} + \int_{\Gamma(h^m)} \psi^{m+1}(w, n) d\Gamma \\ & = \int_{\Omega(h^m)} (j \wedge b - \rho g e_z, w) d\mathbf{x} \quad \forall w \in Y^{HD}, \end{aligned} \right. \quad (2.38)$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{\Omega(h^m)} \nabla \cdot u^{m+1} q d\mathbf{x} = 0 \quad \forall q \in L_0^2(\Omega(h^m)), \end{aligned} \right. \quad (2.39)$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{\Gamma(h^m)} (u^{m+1}, \nabla(z - h^m)) G d\Gamma = 0 \quad \forall G \in L^2(\Gamma(h^m)), \end{aligned} \right. \quad (2.40)$$

$$\left\{ \begin{aligned} & h^{m+1} = h^m + \frac{Cste^{m+1} + \psi^{m+1}}{\{f_3\}_{\Gamma(h^m)}}, \end{aligned} \right. \quad (2.41)$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \iint_D (h^{m+1} - h^m) dx dy = 0. \end{aligned} \right. \quad (2.42)$$

Dans les relations ci-dessus le vecteur n représente la normale unitaire extérieure sur la frontière du domaine Ω_1 .

Remarque 2.3.4: si $(u, p) \in (H^2(\Omega))^3 \times H^1(\Omega)$ on peut montrer que:

$$\psi^{m+1} = \{((-p^{m+1}\mathbb{I} + 2\mu\mathbb{D}u^{m+1})n, n)\}_{\Gamma(h^m)}. \quad (2.43)$$

Les formulations variationnelles (2.38), (2.39) et (2.40) permettent de déterminer u^{m+1} , p^{m+1} et ψ^{m+1} . Les équations (2.41) et (2.42) permettent de déterminer h^{m+1} et $Cste^{m+1}$ donc la nouvelle interface.

2.4 Modélisation de la thermique

Nous présentons maintenant le modèle thermique utilisé pour simuler les phénomènes calorifiques. Puisque nous devons tenir compte du changement de phase solide-liquide (ici le solide est le talus, le liquide est le bain et l'aluminium), nous considérons une formulation en enthalpie du problème. Cette formulation est appelée "problème de Stephan", elle contient:

- l'équation de diffusion-convection,
- le bilan d'énergie sur l'interface solide-liquide, généralement appelé "condition de Stephan".

La variable d'état introduite (enthalpie) se prête de façon naturelle au traitement des alliages, où le changement de phase s'étend sur un intervalle de température non nul. Cette méthode a notamment été introduite dans les travaux de P. A. Gremaud [Gre91] et N. Ahmad [Ahm95]. On parle alors du problème de Stephan formulé en enthalpie-température. Dans cette section nous supposons que le champ électrique et le champ de vitesse sont des fonctions données, on pourra ainsi déterminer la puissance dissipée par effet Joule dans la partie conductrice de la cuve.

2.4.1 Les lois de la thermique

Nous présentons maintenant les équations régissant la thermique. La formulation physique est obtenue à partir du principe de conservation de l'énergie. Notre propos n'est pas ici, d'élaborer ces lois et d'utiliser celles-ci pour obtenir, à travers différentes hypothèses, le modèle thermique. Nous décrivons donc simplement les idées permettant d'établir les équations dans la méthode enthalpique. Pour un développement complet, on pourra notamment consulter [AHJ79]. Le modèle retenu est un modèle macroscopique, c'est-à-dire où le bain et les matériaux qui entrent dans la structure de la cuve sont considérés comme des milieux homogènes. Enfin nous ne tenons pas compte des différentes concentrations de phases microscopiques qui composent le matériau. Le comportement thermique dans le bain, au cours du réchauffement par effet Joule, est donné par une relation d'état reliant la fraction solide à la température. Lors de la solidification ou de la fusion d'un alliage, la transition de phase s'étend sur l'intervalle de température localisé entre la température du liquidus θ_L et celle du solidus θ_S . La chaleur latente de transformation est la somme des accroissements enthalpiques sur cet intervalle de température. Pour les matériaux purs, la transition s'opère de façon isotherme.

Le phénomène de changement de phase est régi principalement par les échanges thermiques modélisés par l'équation de diffusion-convection de la chaleur. Dans notre cas les effets thermiques sont liés au phénomène d'électrolyse, le premier principe de la thermodynamique nous assure que la variation de l'énergie totale dans le domaine étudié est induite par la puissance calorifique "apportée".

En faisant un bilan d'énergie et en introduisant la notion d'enthalpie par unité de volume H qui représente une mesure d'énergie interne ainsi que la température θ , on obtient l'expression suivante valable dans la cellule Λ :

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}(k \nabla \theta) + \rho C_p(u, \nabla \theta) = \mathcal{S}, \quad (2.44)$$

où k est la conductivité thermique, ρ est la densité, C_p est la chaleur spécifique massique, u est la vitesse du fluide dans le bain et \mathcal{S} est le terme source représentant la contribution de l'effet Joule. Ces grandeurs physiques peuvent dépendre de l'espace, de la température et du temps.

Par ailleurs, on sait que l'enthalpie volumique peut être exprimée au moyen de la chaleur spécifique massique $C_p(\theta)$ et de la chaleur latente volumique moyenne de la transformation ℓ sous la forme:

$$H(\theta) = \int_0^\theta \rho C_p(s) ds + \ell(1 - f_s(\theta)) \quad (0 \leq f_s \leq 1), \quad (2.45)$$

où $f_s(\theta)$ est la fraction solide, fraction que nous avons considérée comme fonction de la température θ seulement. Ceci n'est valable que dans l'hypothèse macroscopique.

L'enthalpie volumique est donc une fonction de la température via la donnée de la fraction solide du changement de phase f_s . Dans notre modèle, la fraction solide est obtenue de façon empirique. La Figure 2.4 donne l'exemple de la fraction solide en fonction de la température pour un mélange de Cryolithe 90.75 %, AlF_3 3.25 %, CaF_2 4% et Al_2O_3 2%. Ce mélange constitue la composition chimique principale du talus de solidification dans une cuve d'électrolyse:

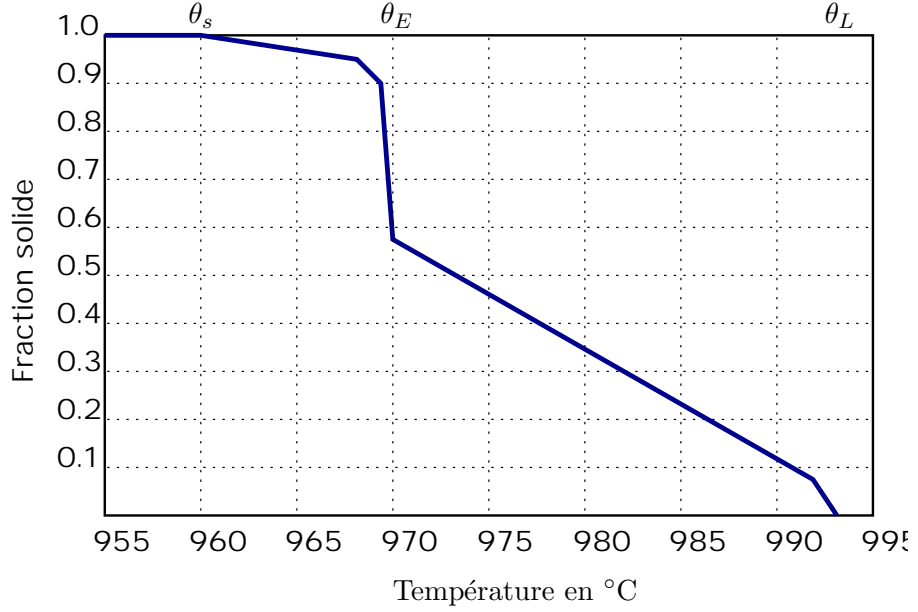


Figure 2.4: fraction solide en fonction de la température

La libération de la chaleur latente au voisinage de la température du liquidus θ_L et, celle produite par la réaction eutectique apparaissent clairement sur la Figure 2.4. On remarque que si la température est inférieure à la température du solidus θ_S , alors $f_s = 1$. Si la température est supérieure à la température du liquidus θ_L , alors $f_s = 0$. A partir de cette relation d'état à l'équilibre, il est possible de reconstruire l'enthalpie pour chaque température. La fonction $H(\theta)$ étant monotone croissante, on peut définir $\beta : H \rightarrow \beta(H)$ par la relation $\beta(H(\theta)) = \theta$ pour tout θ .

Plaçons nous dans la situation où ρ , C_p sont constantes, nous utilisons l'équation (2.44) et la relation $\theta = \beta(H)$ sous forme d'une équation de convection-diffusion non linéaire et nous obtenons ainsi le problème de Stephan formulé en enthalpie -température:

$$(S1) : \begin{cases} \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}(k \nabla \theta) + \rho C_p(u, \nabla \theta) = \mathcal{S}, \\ \theta = \beta(H). \end{cases}$$

Il convient, en outre, d'adjoindre au système (S1) une condition initiale et des conditions limites. Nous effectuons cet ajout dans le sous-paragraphe sur "les lois de la thermique pour le modèle tridimensionnel de la cuve".

Remarque 2.4.1: Puisque $\operatorname{div} u = 0$, les relations S_1 donnent:

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}(k \nabla \theta + \rho C_p \theta u) = \mathcal{S}. \quad (2.46)$$

Si $\Delta = \{(x, y, z, t) : f_s(\theta(x, y, z, t)) \text{ est discontinue}\}$ est l'endroit dans l'espace-temps où le changement de phase se produit, i.e. où f_s présente un saut, alors l'équation (2.46) considérée au sens des distributions implique que:

$$\{H\nu_t - (k \nabla \theta + \rho C_p \theta u, \nu_x)\}_\Delta = 0, \quad (2.47)$$

où (ν_x, ν_t) est la normale unité à Δ sortant du domaine solide et $\{.\}_\Delta$ est le saut de la grandeur en question à travers Δ . Ici l'indice x de ν_x désigne la composante spatiale de ν alors que ν_t désigne la composante temporelle.

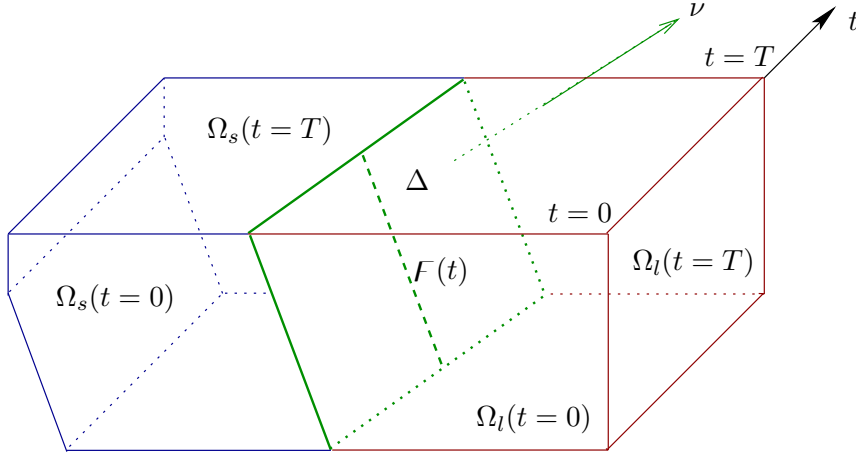


Figure 2.5: avancement du front du talus solidifié dans l'intervalle du temps $[0, T]$,

$\Omega_s(t)$: talus solidifié, $\Omega_l(t)$: bain liquide, $F(t)$: front solide.

Puisque la température θ est continue, $\{\rho C_p u \theta\}_\Delta = 0$ et puisque $\{H\} = \ell$:

$$\ell \nu_t = (k \nabla \theta, \nu_x)\}_\Delta. \quad (2.48)$$

La vitesse d'avance du front solide est donnée par:

$$v_a = \frac{-1}{\|\nu_x\|} (\nu_t n, n), \quad (2.49)$$

où n est la normale unité spatiale au front solide donnée par:

$$n = \frac{\nu_x}{\|\nu_x\|}.$$

Puisque $\frac{\partial \theta}{\partial n} = (\nabla \theta, n)$, nous pouvons donc conclure que:

$$v_a = -\frac{1}{\ell} \left\{ k \frac{\partial \theta}{\partial n} \right\}.$$

Cette dernière relation montre que la vitesse d'avance du front de solidification est proportionnelle au saut du flux de chaleur à travers le front.

La puissance dissipée par effet Joule:

En ne tenant pas compte de la consommation calorifique chimique due à la réaction électrolytique et en considérant que la chute de potentiel électrique due à la dissociation électrolytique est nulle, l'intensité de la source de chaleur dans notre modèle tridimensionnel est alors déterminée par l'effet Joule résultant du passage du courant électrique dans les parties conductrices de la cuve. La puissance volumique instantanée \mathcal{S} s'écrit donc:

$$\mathcal{S} = \sigma \|\nabla \phi\|^2, \quad (2.50)$$

où ϕ est le potentiel électrique et σ la conductivité électrique donnée par 2.1. Nous faisons l'hypothèse que la valeur de σ est suffisamment petite dans le talus, pour que le réchauffement dû à l'effet Joule puisse être négligé.

Les lois de la thermique pour un modèle tridimensionnel de la cuve:

Dans ce paragraphe, nous présentons un modèle thermique tridimensionnel de la cuve sans blocs et griffes anodiques. Grâce aux hypothèses faites sur la géométrie, et en ajoutant une condition initiale et des conditions aux limites, il sera possible de reformuler les équations pour ce modèle.

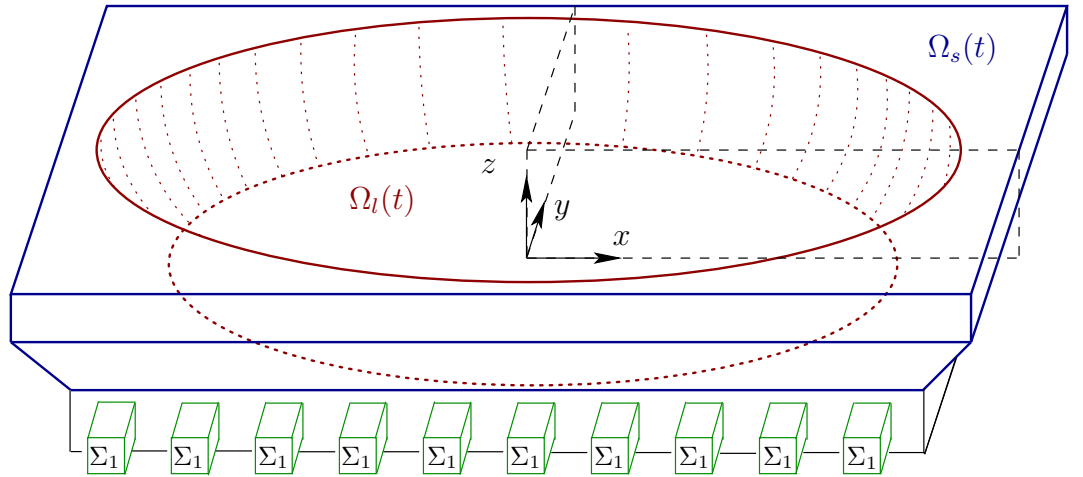


Figure 2.6: modèle tridimensionnel de la cuve,
($\Omega_s(t) \subset \Lambda$): talus solidifié, ($\Omega_l(t) \subset \Lambda$): bain liquide,
($\Sigma_1 \subset \partial\Lambda$): partie du bord située à la barre collectrice.

Comme mentionné plus haut, il convient de donner une condition initiale pour l'enthalpie H . De façon naturelle, cette condition est déduite de la température par la relation $H = \beta^{-1}(\theta)$.

Les conditions aux limites pour la température θ sur la frontière $\partial\Lambda$ du domaine Λ sont choisies du type mixte:

$$k \frac{\partial \theta}{\partial n} = \alpha(\theta_a - \theta)$$

où $\frac{\partial \theta}{\partial n}$ est la dérivée normale extérieure à Λ de la température, α est le coefficient positif de transfert thermique pouvant dépendre de la température et du temps et, θ_a est la température à l'extérieur de Λ . Notons que dans certaines applications nous posons une condition de type Dirichlet sur la partie du bord Σ_1 située sur la barre collectrice:

$$\theta = \theta_0, \text{ sur } \Sigma_1.$$

Soit \tilde{u} le prolongement par zéro de u dans Λ et:

$$Q_T = \Lambda \times]0, T[, \Sigma_T = \partial\Lambda \times]0, T[\text{ et } \Sigma_{1,T} = \Sigma_1 \times]0, T[.$$

Dans une approche tridimensionnelle, les équations du problème thermique prennent alors la forme:

$$(S_2) \quad \begin{cases} \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}(k(\theta)\nabla\theta) + \rho C_p(\tilde{u}, \nabla\theta) = \mathcal{S} & \text{dans } Q_T, & (2.51) \\ \theta = \beta(H) & \text{dans } Q_T, & (2.52) \\ k(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial n} = \alpha(\theta_a - \theta) & \text{sur } \Sigma_T \setminus \Sigma_{1,T}, & (2.53) \\ \theta = \theta_0 & \text{sur } \Sigma_{1,T}, & (2.54) \\ H = H_0 & \text{dans } \Omega, \text{ pour } t = 0. & (2.55) \end{cases}$$

En admettant que la cellule est symétrique dans les directions x et y , certaines applications peuvent être traitées sur une partie restreinte de la cuve formée par un "coin" limité par deux faces situées dans les plan $x = 0$ et $y = 0$ respectivement. Nous imposons alors la condition $\alpha = 0$ sur ces deux faces afin obtenir une condition d'adiabaticité.

2.4.2 Modélisation du problème du contact thermique

Dans la situation qui fait l'objet de notre étude thermique, la cuve d'électrolyse est constituée de plusieurs matériaux, eux mêmes représentés par plusieurs dizaines de sous-domaines en contact les uns avec les autres. Chacun de ces sous-domaines possède une caractéristique thermique propre. De même les joints entre ces sous-domaines possèdent une conductivité thermique propre. Pour des raisons numériques liées au maillage utilisé, nous avons besoin de mettre en œuvre un outil numérique pour simuler le transfert thermique à travers les frontières entre les sous-domaines. Cet outil consiste à remplacer les

joints par des interfaces possédant des caractéristiques thermiques équivalentes.

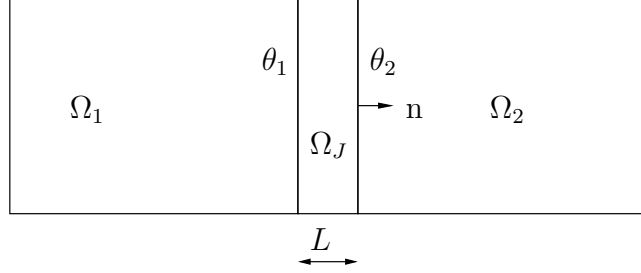


Figure 2.7

Le cas du contact thermique présenté correspondant aux deux domaines Ω_1 , Ω_2 séparés par un joint représenté par le domaine Ω_J , (voir Figure 2.7) sera alors modélisé par deux domaines Ω_1 et Ω_2 qui sont séparés par une interface Γ (voir Figure 2.8).

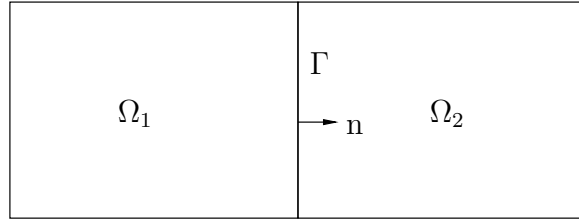


Figure 2.8

En tenant compte de la continuité du flux thermique à travers Γ et en associant à Γ un coefficient de transfert α_Γ , nous modélisons le saut de température $\theta_2 - \theta_1$ par:

$$k_1(\theta_1)(\nabla\theta_1, n) = k_2(\theta_2)(\nabla\theta_2, n) = \alpha_\Gamma(\theta_2 - \theta_1),$$

où

$$\theta_1 = \theta|_{\Omega_1} \quad \text{et} \quad \theta_2 = \theta|_{\Omega_2}$$

et $k_1(\theta)$, $k_2(\theta)$ désignent la conductivité thermique dans les deux domaines Ω_1 , Ω_2 .

D'autre part, si L et k_J désignent respectivement l'épaisseur et la conductivité thermique du joint, le flux thermique est approché par:

$$k_1(\theta_1)(\nabla\theta_1, n) = k_2(\theta_2)(\nabla\theta_2, n) \simeq \frac{k_J}{L}(\theta_2 - \theta_1).$$

Selon cette approche, le coefficient α_Γ introduit artificiellement représente le rapport $\frac{k_J}{L}$ de sorte qu'une relativement faible valeur de α_Γ corresponde à une faible conductivité du

joint. Il s'ensuit que la température subit un saut relativement grand à l'interface Γ . Par contre une valeur relativement forte de α_Γ est associée au cas d'un contact presque parfait qui implique la continuité de la température. Finalement $\alpha_\Gamma = 0$ et $\alpha_\Gamma = \infty$ correspondent respectivement aux cas d'un joint d'une isolation parfaite et d'un contact parfait.

2.4.3 Discrétisation en temps du problème thermique

Afin de résoudre numériquement le système (S_2) , nous effectuons une discrétisation en temps du problème thermique. Nous choisissons ici un schéma de Chernoff semi-implicite, particulièrement bien adapté pour les changements de phase comportant une zone pâteuse. Le front de solidification est obtenu à posteriori, à partir de la solution calculée.

Remarque 2.4.2: On notera que la difficulté de l'intégration en temps vient du fait que la fonction enthalpie-température $\theta = \beta(H)$ a une dérivée nulle lorsque H présente un saut, ce qui conduit à une dégénérescence du problème parabolique. Cette dégénérescence est plus importante dans les cas des matériaux purs où la transition de phase s'effectue de façon isotherme.

Nous utilisons un schéma de type différence finie en temps et nous désignons par τ le pas du temps. Nous posons $t^m = m\tau$, $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ et désignons par $H^m(\mathbf{x})$ une approximation de $H(\mathbf{x}, t^m)$.

Pour expliciter le schéma de Chernoff, nous discrétisons l'équation (2.51) par rapport au temps en utilisant un schéma semi-implicite. L'équation s'écrit:

$$\frac{H^{m+1} - H^m}{\tau} - \nabla \cdot (k(\theta^m) \nabla \theta^{m+1}) + \rho C_p(\tilde{u}, \nabla \theta^{m+1}) = \mathcal{S}^m, \quad (2.56)$$

où $\mathcal{S}^m = \sigma^m \|\nabla \phi\|^2 = \sigma(\theta^m) \|\nabla \phi\|^2$ est pris au temps t^m . Nous relaxons maintenant cette équation de la façon suivante:

$$H = \beta^{-1}(\theta),$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{\beta'(\theta)} \frac{\partial \theta}{\partial t},$$

et nous posons:

$$H^{m+1} = H^m + \gamma(\theta^{m+1} - \beta(H^m)), \quad (2.57)$$

où γ est un paramètre de proportionnalité correspondant à $\frac{1}{\beta'(\theta)}$. D'après les équations (2.56) et (2.57), nous obtenons une formulation semi-implicite pour θ^{m+1} i. e.

$$\gamma \frac{\theta^{m+1} - \beta(H^m)}{\tau} - \nabla \cdot (k(\theta^m) \nabla \theta^{m+1}) + \rho C_p(\tilde{u}, \nabla \theta^{m+1}) = \mathcal{S}^m. \quad (2.58)$$

Remarquons que dans l'équation ci-dessus, la variable θ^{m+1} correspond à une "pseudo température" au temps " t^{m+1} ", la température se déduit du calcul de $\beta(H^{m+1})$. Afin

d'éviter une éventuelle confusion, la "pseudo température" sera dans ce qui suit désignée par $\tilde{\theta}$.

Dans les relations (2.57) et (2.58), γ est un paramètre de relaxation du schéma. Dans [BBR79], le schéma est démontré stable, si γ satisfait la condition suivante:

$$0 < \gamma \leq \frac{1}{\sup_{s \in \mathbb{R}} \beta'(s)}$$

Sous forme discrète (en temps), en posant $H^0 = H_0$, valeur initiale de l'enthalpie à l'instant ($t=0$), le schéma (2.58) s'écrit, avec les conditions limites appropriées, sous la forme suivante:

$$S_3 \left\{ \begin{array}{ll} \gamma \frac{\tilde{\theta}^{m+1} - \beta(H^m)}{\tau} - \nabla \cdot (k(\theta^m) \nabla \tilde{\theta}^{m+1}) + \rho C_p(\tilde{u}, \nabla \tilde{\theta}^{m+1}) = \mathcal{S}^m & \text{dans } \Lambda, \quad (2.59) \\ k(\theta^m) \frac{\partial \tilde{\theta}^{m+1}}{\partial n} = \alpha(\theta_a - \tilde{\theta}^{m+1}) & \text{sur } \partial\Lambda \setminus \Sigma_1 \quad (2.60) \\ \tilde{\theta}^{m+1} = \theta_0 & \text{sur } \Sigma_1, \quad (2.61) \\ H^{m+1} = H^m + \gamma(\tilde{\theta}^{m+1} - \beta(H^m)) & \text{dans } \Lambda, \quad (2.62) \\ \theta^{m+1} = \beta(H^{m+1}). \end{array} \right.$$

Remarque 2.4.3: Le schéma de Chernoff demeure stable quel que soit le pas de temps ce qui justifie le choix de celui-ci. Cette propriété est importante lors de la mise en œuvre du couplage avec le calcul électrique, où il est indispensable d'effectuer le calcul avec un pas du temps (τ) suffisamment grand est indispensable pour assurer la convergence du cycle global avec un minimum d'itérations.

Remarque 2.4.4: Comme nous l'avons déjà dit, $\tilde{\theta}^{m+1}$ est une pseudo-température alors que $\theta^{m+1} = \beta(H^{m+1})$ est la température obtenue numériquement au temps t^{m+1} . Il paraît donc clair que la condition (2.60) sur la pseudo-température n'est pas correcte pour le problème évolutif transitoire.

Cependant, puisque nous cherchons à obtenir un schéma itératif au moyen d'un schéma évolutif pour converger vers une solution stationnaire, alors nous aurons:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} |\tilde{\theta}^{m+1} - \theta^{m+1}| = 0.$$

Ainsi la condition (2.60) devient correcte pour la solution stationnaire.

2.4.4 Formulation variationnelle du problème thermique

Ayant en vue l'utilisation d'une technique d'éléments finis pour la résolution du problème thermique stationnaire, nous mettons les équations (2.59)-(2.61) sous une forme variationnelle. Nous définissons l'espace fonctionnel Y^{Th} par:

$$Y^{Th} = \{\phi \in H^1(\Lambda); \phi = 0 \text{ sur } \Sigma_1\}.$$

En choisissant une valeur initiale H^0 et les valeurs de paramètres γ et τ , nous résolvons le problème suivant:

pour $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ trouver $\tilde{\theta}^{m+1}$, θ^{m+1} avec $(\tilde{\theta}^{m+1} - \theta_0, \theta^{m+1} - \theta_0) \in (Y^{Th})^2$, et $H^{m+1} \in L^2(\Lambda)$ tels que:

$$S_4 \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Lambda} \gamma \frac{\tilde{\theta}^{m+1} - \beta(H^m)}{\tau} \varphi d\mathbf{x} + \int_{\Lambda} k(\theta^m) (\nabla \tilde{\theta}^{m+1}, \nabla \varphi) d\mathbf{x} \\ - \int_{\partial\Lambda \setminus \Sigma_1} \alpha(\theta_a - \tilde{\theta}^{m+1}) \varphi d\Sigma + \int_{\Lambda} \rho C_p(\tilde{u}, \nabla \tilde{\theta}^{m+1}) \varphi d\mathbf{x} = \\ \int_{\Lambda} \mathcal{S}^m \varphi d\mathbf{x} \quad \forall \varphi \in Y^{Th}, \quad (2.63) \\ H^{m+1} = H^m + \gamma (\tilde{\theta}^{m+1} - \beta(H^m)) \quad \text{dans } \Lambda, \quad (2.64) \\ \theta^{m+1} = \beta(H^{m+1}) \quad \text{dans } \Lambda. \quad (2.65) \end{array} \right.$$

2.5 Ecriture du problème couplé

Dans les sections précédentes nous avons présenté les modèles: électromagnétique, hydrodynamique et thermique utilisés pour la résolution du problème de solidification dans la cellule de Hall-Héroult. Pour simplifier, cette présentation a été faite en introduisant un découplage. Il reste maintenant à effectuer le couplage entre les trois systèmes à résoudre. Nous considérons à cet effet une situation géométrique tridimensionnelle commune aux trois problèmes. Nous prenons le domaine de la cuve représentée en coupe transversale et horizontale par les Figures 2.2 et 2.8 respectivement.

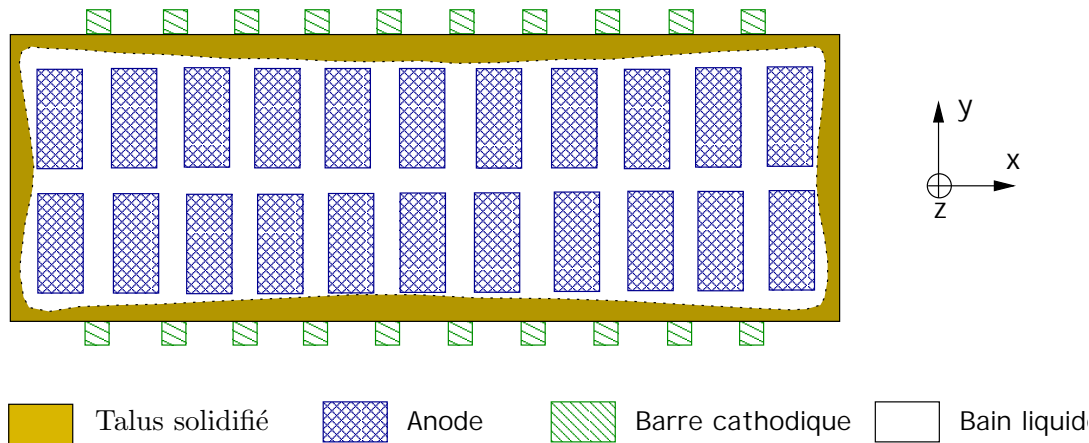


Figure 2.9: La cuve d'électrolyse, vue de dessus.

Après avoir établi le choix des paramètres τ et γ qui correspondent au schéma pseudo-évolutif (Chernoff) du calcul thermique, nous considérons une solidification qui évolue à chaque pas itératif de ce schéma. Ces itérations doivent alors converger vers l'état stationnaire qui dessine le profil définitif du talus.

Le couplage décrivant cette solidification doit aussi se faire d'une manière itérative. Chaque itération m fait appel successivement aux modules: thermique, électromagnétique et hydrodynamique. Soit:

$$0 = t^0 < t^1 < \dots < t^{m-1} < t^m < t^{m+1} \dots$$

où le pseudo-temps (t^m) est donné par $t^m = m\tau$, $m = 1, 2, 3, \dots$. Nous introduisons ainsi les notations suivantes:

$$\theta^m = \theta(t^m), H^m = H(t^m), K^m = K(\theta^m), k^m = k(\theta^m), \sigma^m = \sigma(\theta^m),$$

$$\Omega^m = \Omega(h^m) \text{ et } \Gamma^m = \Gamma(h^m).$$

Le problème de solidification thermique dans une situation tridimensionnelle, revient à résoudre un système non linéaire couplé correspondant à MHD-thermique et permettant de calculer le triplet (j^m, u^m, θ^m) . Il s'écrit à partir des systèmes d'équations décrits précédemment de la façon suivante:

nous commençons par l'initialisation des valeurs suivantes à l'instant ($t = 0$):

$$H^0 = H_0, k^0 = k_0, \sigma^0 = \sigma_0, \text{ et } u^0 = (0,0,0).$$

Ceci permet d'effectuer une itération du calcul thermique "primaire" et d'obtenir θ^0 . De même pour $m = 1, 2, 3, \dots$, nous faisons le calcul thermique S_{Th}^{m-1} à l'itération $m - 1$. Les résultats ainsi obtenus sont ensuite utilisés pour "corriger" les valeurs physiques entrant dans les calculs électromagnétique S_{EM}^m puis hydrodynamique S_{HD}^m à l'itération suivante m . Cet algorithme de résolution correspond à ce qui est représenté dans la Figure 2.10:

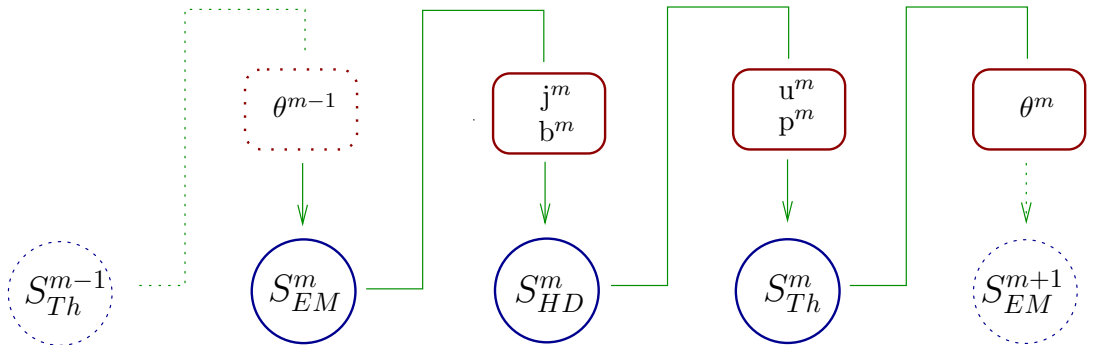


Figure 2.10: résolution itérative du problème de couplage MHD-Thermique.
 S_{EM}^m , S_{HD}^m , S_{Th}^m : itérations du calcul électromagnétique, hydrodynamique et thermique.

En utilisant le schéma de discrétisation proposé dans la section (2.2) pour le problème électromagnétique, nous cherchons le couple $(\mathbf{j}^m, \mathbf{b}^m)$ solution du système:

$$S_{EM}^m \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Lambda} (\sigma^{m-1}(\nabla \phi^m, \nabla v) - \sigma^{m-1}(\tilde{\mathbf{u}}^{m-1} \wedge \mathbf{b}^{m-1}, \nabla v)) d\mathbf{x} = \\ - \int_{\Sigma_2} (\mathbf{j}_0, n) v d\Sigma \quad \forall v \in Y^{EM}, \\ \mathbf{j}^m = \sigma^{m-1}(-\nabla \phi^m + \tilde{\mathbf{u}}^{m-1} \wedge \mathbf{b}^{m-1}) \quad \text{dans } \Lambda, \\ \mathbf{b}^m(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Lambda} \frac{\mathbf{j}^m(\mathbf{y}) \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^3} d\mathbf{y} + \mathbf{b}_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Lambda. \end{array} \right. \quad (2.66)$$

Nous calculons le quadriplet $(\mathbf{u}^m, \mathbf{p}^m, h^m, \psi^m)$ en faisant usage du schéma de discrétisation proposé dans la section (2.3):

$$S_{HD}^m \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega^{m-1}} \rho((\mathbf{u}^{m-1}, \nabla) \mathbf{u}^m, w) d\mathbf{x} + 2\mu \int_{\Omega^{m-1}} \mathbb{D}\mathbf{u}^m : \mathbb{D}w d\mathbf{x} \\ - \int_{\Omega^{m-1}} \mathbf{p}^m \nabla \cdot w d\mathbf{x} + \int_{\Omega^{m-1}} K^{m-1}(\mathbf{u}^m, w) d\mathbf{x} + \int_{\Gamma^{m-1}} \psi^m(w, n) d\Gamma = \\ \int_{\Omega^{m-1}} (\mathbf{j}^m \wedge \mathbf{b}^m - \rho g e_z, w) d\mathbf{x} \quad \forall w \in Y^{HD}, \\ \int_{\Omega^{m-1}} \nabla \cdot \mathbf{u}^m q d\mathbf{x} = 0, \quad \forall q \in L_0^2(\Omega^{m-1}), \\ \int_{\Gamma^{m-1}} (\mathbf{u}^m, \nabla(z - h^{m-1})) G d\Gamma = 0 \quad \forall G \in L^2(\Gamma^{m-1}), \\ h^m = h^{m-1} + \frac{Cste^m + \psi^m}{\{(\mathbf{j}^m \wedge \mathbf{b}^m, e_z) - \rho g\}_{\Gamma^{m-1}}}, \\ \iint_D (h^m - h^{m-1}) dx dy = 0, \\ \tilde{\mathbf{u}}|_{\Omega^m}^m = \mathbf{u}^m. \end{array} \right. \quad (2.69)$$

En utilisant le schéma de Chernoff introduit dans la section (2.4) pour le problème thermique, nous cherchons le triplet $(\tilde{\theta}^m, \theta^m, H^m)$ solution du système:

$$S_{Th}^m \left\{ \begin{array}{ll} \int_{\Lambda} \gamma \frac{\tilde{\theta}^m - \beta(H^{m-1})}{\tau} \varphi d\mathbf{x} + \int_{\Lambda} k^{m-1} (\nabla \tilde{\theta}^m, \nabla \varphi) d\mathbf{x} \\ - \int_{\partial\Lambda \setminus \Sigma_1} \alpha(\theta_a - \tilde{\theta}^m) \varphi d\Sigma + \int_{\Lambda} \rho C_p(\tilde{u}^m, \nabla \tilde{\theta}^m) \varphi d\mathbf{x} = \\ \int_{\Lambda} \mathcal{S}^m \varphi d\mathbf{x} & \forall \varphi \in Y^{Th}, \quad (2.75) \\ H^m = H^{m-1} + \gamma(\tilde{\theta}^m - \beta(H^{m-1})) & \text{dans } \Lambda, \quad (2.76) \\ \theta^m = \beta(H^m) & \text{dans } \Lambda. \quad (2.77) \end{array} \right.$$

Remarque 2.5.1: Le terme source \mathcal{S}^m s'écrit:

$$\mathcal{S}^m = \sigma^{m-1} \|\nabla \phi^m\|^2. \quad (2.78)$$

Remarque 2.5.2: Le critère de convergence pour le triplet $(\tilde{u}^m, \phi^m, \theta^m)$ est donné par:

$$\|\tilde{u}^m - \tilde{u}^{m-1}\|_{(L^2(\Lambda))^3} + \|\phi^m - \phi^{m-1}\|_{L^2(\Lambda)} + \|\theta^m - \theta^{m-1}\|_{L^2(\Lambda)} < \varepsilon,$$

où ε est une valeur suffisamment petite pour assurer la convergence du schéma numérique.

Chapitre 3

Méthodes et tests numériques

Dans le chapitre 2, nous avons obtenu une version semi-discrétisée, en temps, des équations à résoudre. Il reste maintenant à effectuer une discrétisation spatiale. Dans ce but, nous décrivons la méthode de type éléments finis que nous mettons en œuvre à partir d'une formulation faible du problème et nous introduisons une partition \mathcal{T}_h du domaine $\bar{\Lambda}$. Nous définissons ensuite l'espace d'éléments finis des fonctions \mathbb{P}_1 (fonctions continues, polynomiales de degré 1 sur chaque éléments de \mathcal{T}_h) dans lequel nous cherchons les solutions.

Le problème des oscillations numériques relatif au cas de convection-diffusion est présenté avec la technique de stabilisation SUPG (Streamline Upwind Petrov Galerkin).

La deuxième section présente des tests effectués sur le problème thermique permettant de valider l'implémentation informatique effectuée.

3.1 Les traitements numériques du problème thermique

Nous présentons les méthodes numériques utilisées pour la discrétisation spatiale des formulations faibles. Une description de la résolution du système matriciel qui en découle est de ce fait introduite dans ce contexte.

3.1.1 Discrétisation spatiale de la formulation faible

Ayant en vue la mise en œuvre d'une méthode d'éléments finis pour résoudre numériquement les systèmes d'équations apparaissant dans le problème de solidification, nous commençons par opérer une décomposition tétraédrique du domaine Λ (voir Figure 3.1).

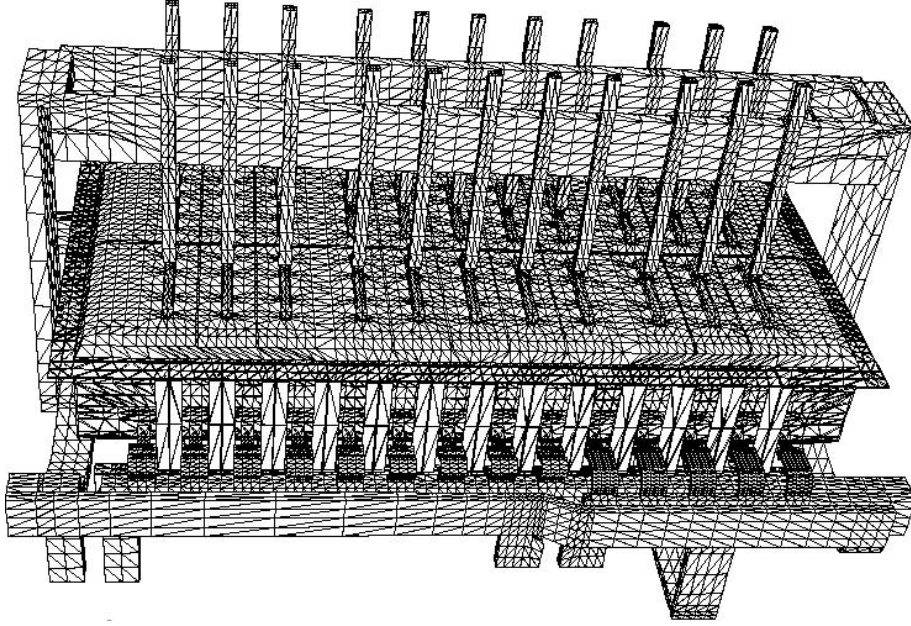


Figure 3.1: Maillage tétraédrique d'une cuve complète

Nous conservons les notations introduites lors de la modélisation et nous utilisons une méthode numérique de type “Galerkin”. Nous cherchons ainsi, les diverses inconnues de la formulation faible, dans des sous-espaces de dimensions finies.

Nous présentons la méthode d'éléments finis en nous restreignant à la résolution du problème thermique qui pourra être couplée à la résolution du problème MHD déjà effectuée dans la routine ALUCCELL.

Nous supposons que Λ est un ouvert polyédrique dans \mathbb{R}^3 . La notation \mathcal{T}_h déjà introduite désigne ainsi la décomposition tétraédrique de $\bar{\Lambda}$. Pour tout tétraèdre K appartenant à \mathcal{T}_h , nous désignons par h_K le rayon de la plus petite sphère contenant K . La taille du maillage est définie de la façon suivante:

$$h = \max_{K \in \mathcal{T}_h} h_K.$$

Nous garantissons de plus que la décomposition tétraédrique est non dégénérée. Les N sommets composant le maillage \mathcal{T}_h sont notés $P_1, P_2, \dots, P_M, P_{M+1}, P_{M+2}, \dots, P_N$. Nous désignons ainsi par M le nombre de noeuds du maillage qui ne sont pas situés sur la partie du bord Σ_1 .

Nous choisissons d'associer à chaque tétraèdre un élément fini de Lagrange, de type \mathbb{P}_1 , i.e. dont les éléments appartiennent à l'ensemble des polynômes de degré un. Une méthode d'éléments finis consiste à chercher une solution dans un espace de dimension finie. Nous pouvons alors définir les espaces d'éléments finis (sous-espaces discrets) Y_h^{Th} correspondant aux espaces Y^{Th} déjà introduits au chapitre 2. Nous rappelons que:

$$Y^{Th} = \{\phi \in H^1(\Lambda); \phi = 0 \text{ sur } \Sigma_1\}.$$

Ainsi l'espace éléments finis correspondant est donné par:

$$Y_h^{Th} = \{\varphi \in C^0(\bar{\Lambda}); \varphi|_K \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \mathcal{T}_h, \varphi = 0 \text{ sur } \Sigma_1\}.$$

A chaque noeud P_i , ($1 \leq i \leq N$) du maillage \mathcal{T}_h , correspond une fonction φ_i polynomiale de degré 1 par morceau telle que $\varphi_i(P_j) = \delta_{ij}$, $j = 1, 2, 3 \dots N$. Notons que l'ensemble des fonctions "chapeau" $\{\varphi_i\}_{1 \leq i \leq N}$ forme une base de l'espace éléments finis Y_h^{Th} .

Considérons à présent $\tilde{\theta}_h^m$, θ_h^m et H_h^m des approximations de $\tilde{\theta}^m$, θ^m et H^m respectivement dans le problème (2.63) – (2.65) du chapitre 2. Une discrétisation en espace consiste à écrire $\tilde{\theta}_h^m$, θ_h^m et H_h^m sous la forme:

$$\tilde{\theta}_h^m = \sum_{i=1}^M \tilde{\theta}_i^m \varphi_i + \sum_{i=M+1}^N \theta_0(P_i) \varphi_i, \quad \theta_h^m = \sum_{i=1}^M \theta_i^m \varphi_i + \sum_{i=M+1}^N \theta_0(P_i) \varphi_i \quad (3.1)$$

et

$$H_h^m = \sum_{i=1}^M H_i^m \varphi_i + \sum_{i=M+1}^N \beta^{-1}(\theta_0(P_i)) \varphi_i, \quad (3.2)$$

où les coefficients $\tilde{\theta}_i^m$, θ_i^m et H_i^m , sont les inconnues du problème correspondant à l'itération (m). Ces définitions étant posées, nous désignons par r_h l'interpolant de Lagrange correspondant à la base éléments finis. Nous pouvons alors écrire le problème discret correspondant au problème S_4 du chapitre 2 (cf. (2.63) – (2.65)) sous la forme: trouver $(\tilde{\theta}_h^{m+1}, \theta_h^{m+1}, H_h^{m+1})$ avec $(\tilde{\theta}_h^{m+1} - r_h(\theta_0), \theta_h^{m+1} - r_h(\theta_0), H_h^{m+1} - r_h(\beta^{-1}(\theta_0))) \in (Y_h^{Th})^3$ et tels que:

$$S_h^1 \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Lambda} \gamma \frac{\tilde{\theta}_h^{m+1} - \beta(H_h^m)}{\tau} \varphi_h d\mathbf{x} + \int_{\Lambda} k^m (\nabla \tilde{\theta}_h^{m+1}, \nabla \varphi_h) d\mathbf{x} \\ - \int_{\partial\Lambda \setminus \Sigma_1} \alpha(\theta_a - \tilde{\theta}_h^{m+1}) \varphi_h d\Sigma + \int_{\Lambda} \rho C_p (\tilde{u}, \nabla \tilde{\theta}_h^{m+1}) \varphi_h d\mathbf{x} = \\ \int_{\Lambda} \mathcal{S}^m \varphi_h d\mathbf{x} \quad \forall \varphi_h \in Y_h^{Th}, \quad (3.3) \\ H_h^{m+1} = H_h^m + \gamma(\tilde{\theta}_h^{m+1} - \beta(H_h^m)) \quad \text{dans } \Lambda, \quad (3.4) \\ \theta_h^{m+1} = \beta(H_h^{m+1}) \quad \text{dans } \Lambda. \quad (3.5) \end{array} \right.$$

On notera que $k^m = k(\theta_h^m)$ désigne le terme de la conductivité thermique.

Remarque 3.1: Nous savons que l'enthalpie H n'est pas continue sur $\bar{\Lambda}$ mais qu'elle présente un saut sur le front de solidification. Comme celui-ci n'est pas connu à priori,

nous approchons H dans les sous-espaces de fonctions continues. De ce fait, les approximations de H vont avoir de forts gradients là où l'enthalpie exacte présente une discontinuité. Néanmoins le problème dans sa forme discrétisée est bien posé. Notons cependant que la convergence des approximations de l'enthalpie vers la solution H n'aura lieu qu'au sens $L^2(\Lambda)$.

La forme matricielle du système d'équations à résoudre sera présentée dans les parties suivantes après l'introduction des méthodes de stabilisation numérique.

3.1.2 Oscillations numériques et la méthode SUPG

Dans ce paragraphe, nous traitons le problème d'oscillations numériques rencontré lors de l'usage des schémas numériques standards pour résoudre certains problèmes de la chaleur.

En effet, ces oscillations ont lieu dans le cas où il existe un terme convectif comparable au terme de diffusion, entraînant une valeur du nombre de Péclet local supérieur à un.

Par souci de clarté nous présentons la situation du problème simple suivant: calculer le champ de température dans une cavité rectangulaire de longueur L , traversée de gauche à droite par un fluide de vitesse $u = (u, 0)$. Cette cavité est supposée isolée sur les parties inférieure et supérieure du bord. La température sur les parties gauche et droite du bord est supposée maintenue à α °C et β °C respectivement (voir Figure 3.2). Ce problème qui est déjà présenté dans ([AHM95] Page 57) est fréquemment rencontré dans les applications liées aux transferts thermiques traités par les ingénieurs.

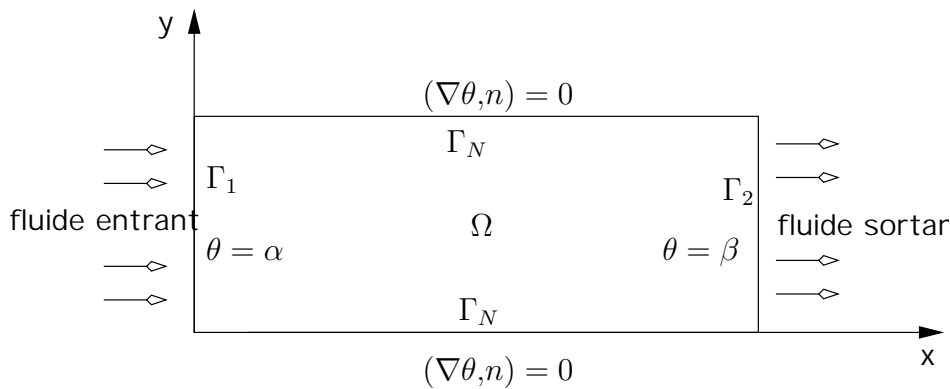


Figure 3.2: cavité rectangulaire de longueur L traversée par un fluide

Le modèle mathématique standard pour ce problème de convection-diffusion a la forme suivante:

$$(S_1) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p \frac{\partial \theta}{\partial t} - k \Delta \theta + \rho C_p (\mathbf{u}, \nabla \theta) = 0, & \text{dans } \Omega \times]0, T[, \\ \theta = \alpha & \text{sur } \Gamma_1 \times]0, T[, \\ \theta = \beta & \text{sur } \Gamma_2 \times]0, T[, \\ (\nabla \theta, \mathbf{n}) = 0 & \text{sur } \Gamma_N \times]0, T[, \\ \theta(x, y, 0) = \bar{\theta}_0(x, y) & \forall (x, y) \in \Omega, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3.6) \\ (3.7) \\ (3.8) \\ (3.9) \\ (3.10) \end{array}$$

où θ est la température, \mathbf{u} est un champ de vitesse à divergence nulle (i.e. $\mathbf{u} = \text{cste}$), k est la conductivité thermique et $\bar{\theta}_0$ est la distribution initiale de la température. Dans un premier temps la température évolue, puis atteint un régime stationnaire. Grâce à l'invariance selon l'axe Oy le problème stationnaire peut être formulé comme un problème unidimensionnel ayant la forme suivante:

$$(S_2) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p u \theta' = k \theta'' & \forall x \in (0, L), \\ \theta(0) = \alpha \quad \text{et} \quad \theta(L) = \beta. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3.11) \\ (3.12) \end{array}$$

Si $\rho C_p = 1$, la solution exacte de S_2 est donnée par:

$$\theta(x) = \frac{1}{e^{\frac{uL}{k}} - 1} (a e^{\frac{ux}{k}} + b),$$

où

$$a = \beta - \alpha, \quad b = \alpha e^{\frac{uL}{k}} - \beta.$$

Nous reprenons le système (3.6)-(3.10) sous la forme faible suivante:

Trouver une fonction $t \in [0, T] \rightarrow \theta(t) \in H^1(\Omega)$ tel que $\theta = \alpha$ sur Γ_1 , $\theta = \beta$ sur Γ_2 avec:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho C_p (\mathbf{u}, \nabla \theta) \right) \psi d\mathbf{x} + \int_{\Omega} k (\nabla \theta, \nabla \psi) d\mathbf{x} = 0, \quad \forall \psi \in H^1(\Omega) \text{ tel que } \psi = 0 \text{ sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_2. \text{ p.p. } t \in [0, T] \quad (3.13)$$

Nous réalisons un maillage en triangularisant le domaine $\bar{\Omega}$ et nous désignons la triangulation par \mathcal{T}_h . Pour tout triangle \underline{K} appartenant à \mathcal{T}_h , nous désignons par $\underline{h}_{\underline{K}}$ le rayon du plus petit disque contenant \underline{K} . La taille du maillage est définie de la façon suivante:

$$\underline{h} = \max\{\underline{h}_{\underline{K}}, \underline{K} \in \mathcal{T}_h\}.$$

Nous définissons l'espace d'éléments finis $Y_{\underline{h}}$ des fonctions \mathbb{P}_1 (à savoir des fonctions linéaires sur chaque triangle \underline{K} de la triangulation \mathcal{T}_h) qui sont continues sur $\bar{\Omega}$ et qui s'annulent sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$. A chaque noeud \underline{P}_i , ($1 \leq i \leq \underline{M}$) de la triangulation correspond

une fonction de base $\varphi_{\underline{i}}$ qui est une fonction “chapeau” classique.
La formulation de Galerkin qui correspond à (3.13) est la suivante:

$$\int_{\Omega} \rho C_p \left(\frac{\partial \theta_{\underline{h}}}{\partial t} + (\mathbf{u}, \nabla \theta_{\underline{h}}) \right) \psi_{\underline{h}} d\mathbf{x} + \int_{\Omega} k (\nabla \theta_{\underline{h}}, \nabla \psi_{\underline{h}}) d\mathbf{x} = 0, \forall \psi_{\underline{h}} \in Y_{\underline{h}}. \quad (3.14)$$

Le nombre de Péclet numérique local $Pe_{\underline{K}}$ est donné dans chaque élément \underline{K} du maillage par:

$$Pe_{\underline{K}} = \rho C_p \frac{1}{3} \frac{u_{\underline{h}_{\underline{K}}}}{k}.$$

Pour simplifier l'exposé nous supposons que $\alpha = 0$, $\beta = 1$, $L = 1$, $\rho C_p = 1$, $u = 30$ et $k = 0.5$, ce qui donne lieu à un nombre de Péclet ayant la valeur $Pe_{\underline{K}} = 2$ pour $\underline{h} = 0.1$. La solution stationnaire $\theta_{\underline{h}}$ du problème (3.14) présente dans ce cas des oscillations. La Figure 3.3 donne la variation selon l'axe (Ox) de $\theta_{\underline{h}}$ et de la solution exacte θ respectivement.

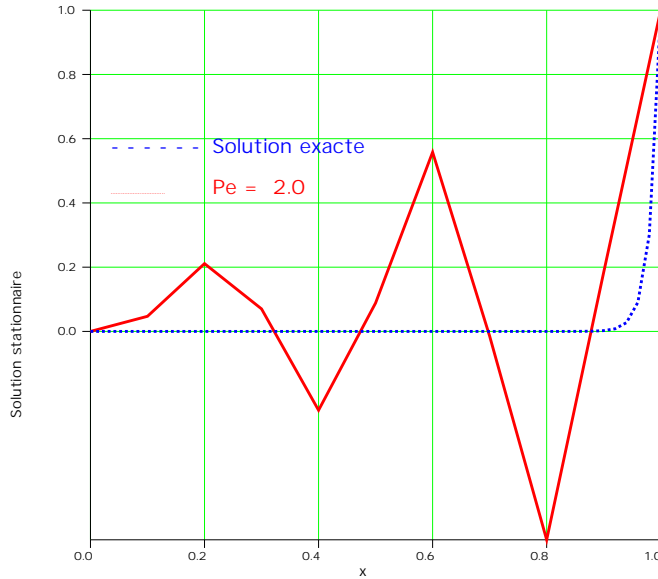


Figure 3.3: $Pe_{\underline{K}} = 2$, la solution numérique est complètement faussée.

Par contre la méthode SUPG consiste à choisir la fonction test $\psi_{\underline{h}}$ de la manière suivante:

$$\psi_{\underline{h}} = \varphi_{\underline{h}} + p_{\underline{h}}, \quad (3.15)$$

où $\varphi_{\underline{h}}$ appartient à $Y_{\underline{h}}$ et $p_{\underline{h}}$ est une fonction, continue à l'intérieur des éléments, qui présente une discontinuité aux bords de ces derniers. Cette fonction est donnée par:

$$p_{\underline{h}} = C_1 \frac{\delta_{\underline{K}} \underline{h}_{\underline{K}}}{\|\mathbf{u}\|} (\mathbf{u}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) \quad \text{dans } \underline{K} \in \mathcal{T}_{\underline{h}}. \quad (3.16)$$

Ici \mathbf{u} désigne le vecteur vitesse, C_1 est constante positive et $\delta_{\underline{K}}$ est une valeur réelle positive qui dépend de $Pe_{\underline{K}}$ (voir [FFH92]):

$$\delta_{\underline{K}} = \begin{cases} Pe_{\underline{K}} & \text{si } Pe_{\underline{K}} < 1, \\ 1 & \text{si } Pe_{\underline{K}} \geq 1, \end{cases} \quad (3.17)$$

Sous ces conditions la formulation Galerkin du problème (3.6),(3.10), est donnée par:

$$\int_{\Omega} \rho C_p \left(\frac{\partial \theta_{\underline{h}}}{\partial t} + (\mathbf{u}, \nabla \theta_{\underline{h}}) \right) \varphi_{\underline{h}} d\mathbf{x} + k \int_{\Omega} (\nabla \theta_{\underline{h}}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x} + \sum_{\underline{K} \in \mathcal{T}_{\underline{h}}} \int_{\underline{K}} \rho C_p \left(\frac{\partial \theta_{\underline{h}}}{\partial t} + (\mathbf{u}, \nabla \theta_{\underline{h}}) \right) p_{\underline{h}} d\mathbf{x} = 0. \quad (3.18)$$

Nous remarquons que ce procédé doit conduire à un équilibre de diffusion. La consistance de cette approche est due au fait que lorsque $\underline{h} \rightarrow 0$ la forme (3.18) tend vers l'approximation numérique du problème (3.9),(3.10).

Des cas tests introduit dans [BrH82] montrent que cette méthode est utile pour éliminer les oscillations. A titre d'exemple nous appliquons la méthode SUPG au cas test déjà présenté dans la Figure 3.3, les résultats obtenus sont représentés dans la Figure 3.4. Nous remarquons que les oscillations observées dans la Figure 3.3 ont disparu.

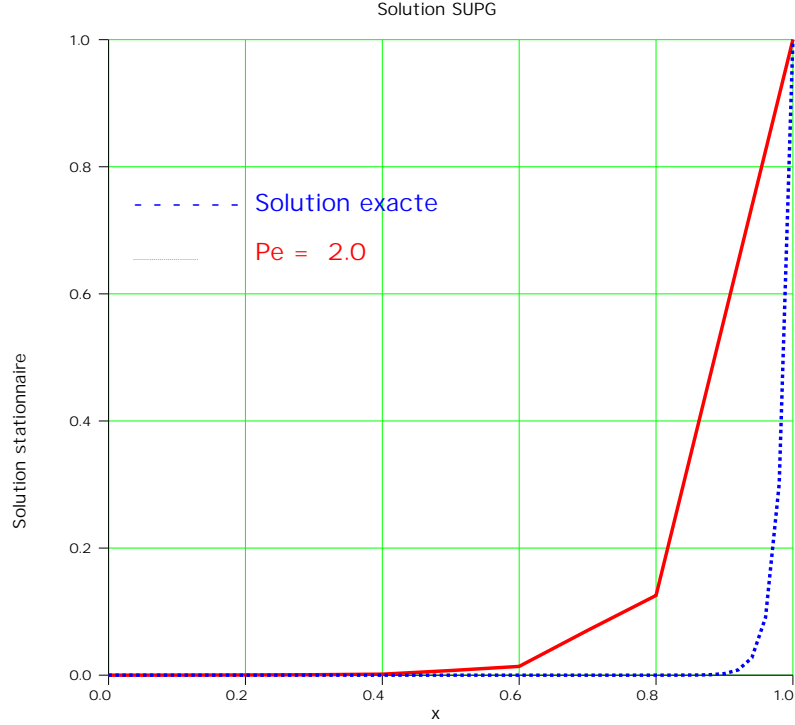


Figure 3.4: en utilisant SUPG avec $\delta = 1.5$, la solution numérique ne présente aucune oscillation.

Il est clair que le terme de diffusion numérique, introduit dans (3.18) par:

$$\sum_{\underline{K} \in \mathcal{T}_{\underline{h}}} \int_{\underline{K}} \rho C_p (\mathbf{u}, \nabla \theta_{\underline{h}}) p_{\underline{h}} d\mathbf{x} = \sum_{\underline{K} \in \mathcal{T}_{\underline{h}}} C_1 \int_{\underline{K}} \rho C_p \frac{\delta_{\underline{K}} h_{\underline{K}}}{\|\mathbf{u}\|} (\mathbf{u}, \nabla \theta_{\underline{h}}) (\mathbf{u}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x},$$

opère seulement dans la direction longitudinale relative à la vitesse \mathbf{u} . En d'autres termes la diffusion numérique de la méthode SUPG, n'a pas lieu dans la direction transversale i.e. la direction orthogonale à celle du champ de vitesse.

Implantation de diffusion numérique transverse:

Comme déjà mentionné l'usage de la méthode SUPG introduit une diffusion numérique suivant la direction longitudinale relative à la vitesse, ce qui montre que cette méthode ne permet pas de remédier de façon satisfaisante aux oscillations numériques dans les cas multidimensionnels. Pour mettre en évidence l'efficacité limitée de cette méthode nous introduisons le cas test suivant déjà présenté dans ([FFH92]).

Nous considérons le problème de convection diffusion stationnaire dans le domaine bidimensionnel carré $\Omega =]0,1[\times]0,1[$ i.e.

$$(S_3) \quad \begin{cases} -k\Delta\theta + \rho C_p(\mathbf{u}, \nabla\theta) = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \theta = 1 & \text{sur } \Gamma_1 \cup \Gamma_2, \\ \theta = 0 & \text{sur } \partial\Omega \setminus (\Gamma_1 \cup \Gamma_2), \end{cases} \quad (3.19)$$

où Γ_1 et Γ_2 désignent les parties du bord $\partial\Omega$ situées en $x = 0$ et $y = 1$ respectivement (voir Figure 3.5). Le champ de vitesse est donné par le vecteur $\mathbf{u} = (2,1)$.

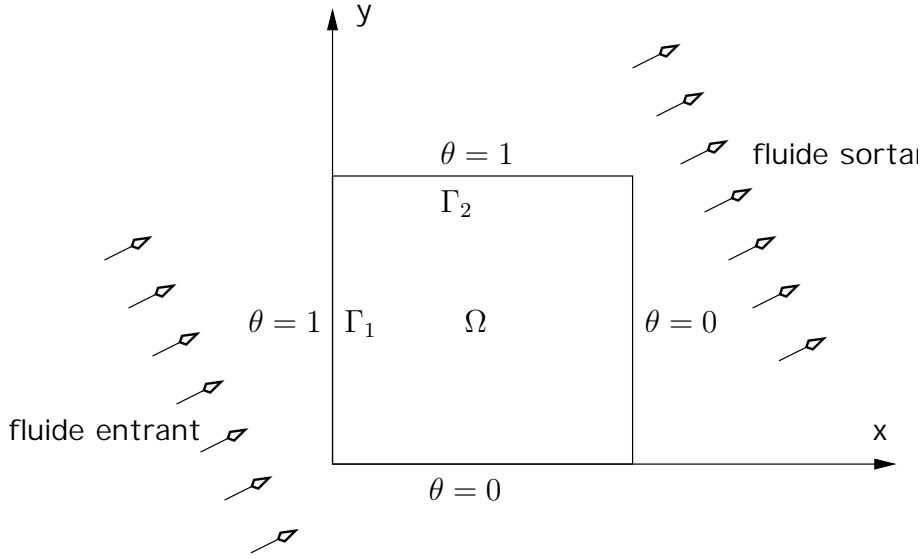


Figure 3.5: cavité carrée traversée par un fluide

La formulation faible du problème (3.19) – (3.21) est donnée par:

Trouver $\theta \in H^1(\Omega)$ tel que $\theta = 1$ sur $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$, $\theta = 0$ sur $\partial\Omega \setminus (\Gamma_1 \cup \Gamma_2)$ avec:

$$\int_{\Omega} \rho C_p(\mathbf{u}, \nabla\theta) \psi d\mathbf{x} + \int_{\Omega} k(\nabla\theta, \nabla\psi) d\mathbf{x} = 0, \quad \forall \psi \in H^1(\Omega) \text{ tel que } \psi = 0 \text{ sur } \partial\Omega. \quad (3.22)$$

La formulation SUPG qui correspond à l'équation (3.22) s'écrit sous la forme:

$$\int_{\Omega} \rho C_p (\mathbf{u}, \nabla \theta_{\underline{h}}) \varphi_{\underline{h}} d\mathbf{x} + \int_{\Omega} k (\nabla \theta_{\underline{h}}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x} + \sum_{\underline{K} \in \mathcal{T}_{\underline{h}}} \int_{\underline{K}} C_1 \rho C_p \frac{\delta_{\underline{K}} h_{\underline{K}}}{\|\mathbf{u}\|} (\mathbf{u}, \nabla \theta_{\underline{h}}) (\mathbf{u}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x} = 0. \quad (3.23)$$

Ici la valeur de la conductivité thermique k est choisie de l'ordre de 10^{-6} avec $\rho C_p = 1$ ce qui implique que le problème traité possède une convection dominante. Pour un maillage relativement fin ayant 3721 noeuds et 7200 éléments, où $\underline{h} = 1/120$, et où la valeur du nombre de Péclet $Pe_{\underline{K}}$ vaut 5555, nous obtenons, en utilisant la méthode SUPG, la solution présentée dans la Figure 3.6.

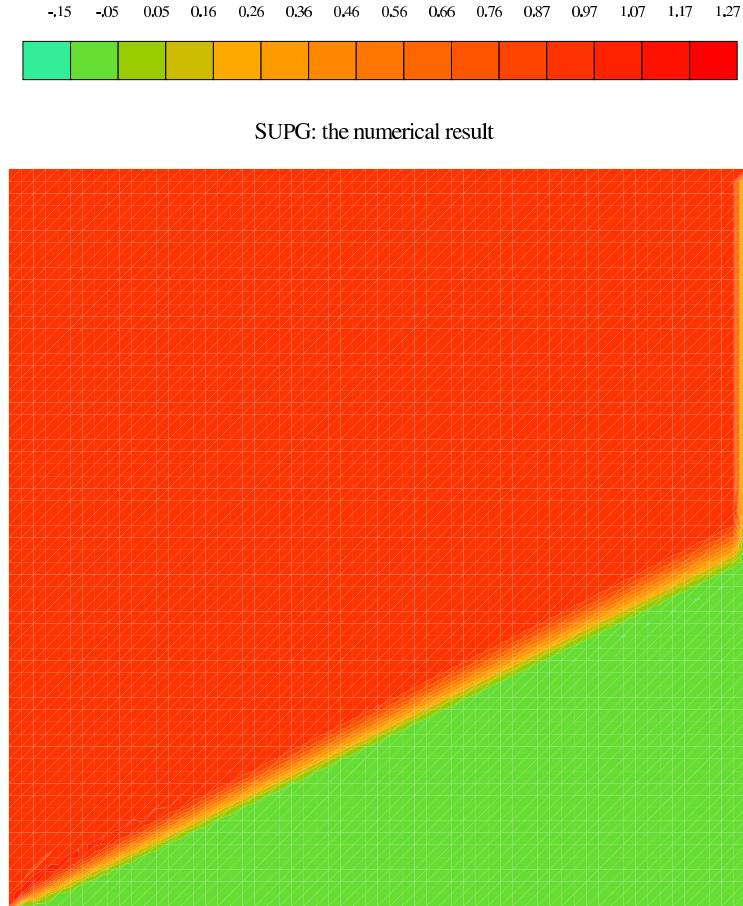
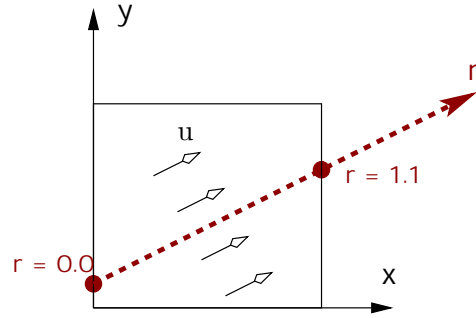
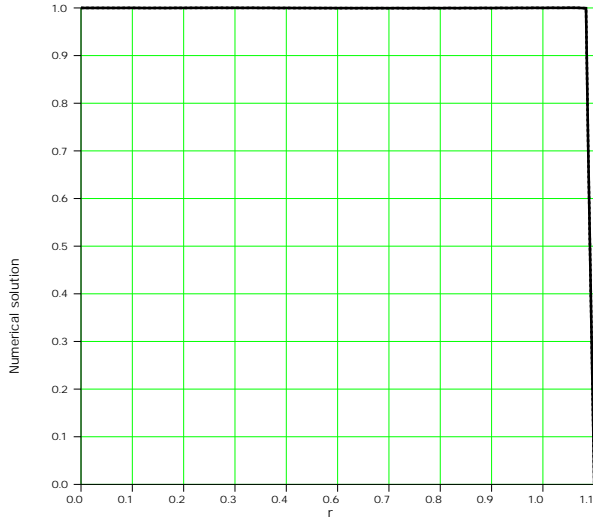


Figure 3.6: isovaleur des résultats numériques obtenus en utilisant SUPG

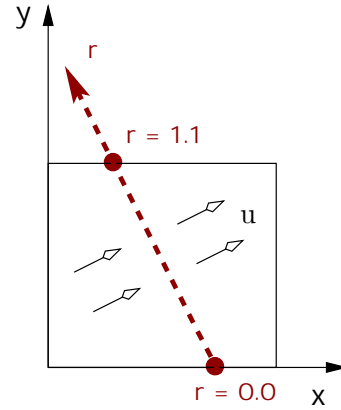
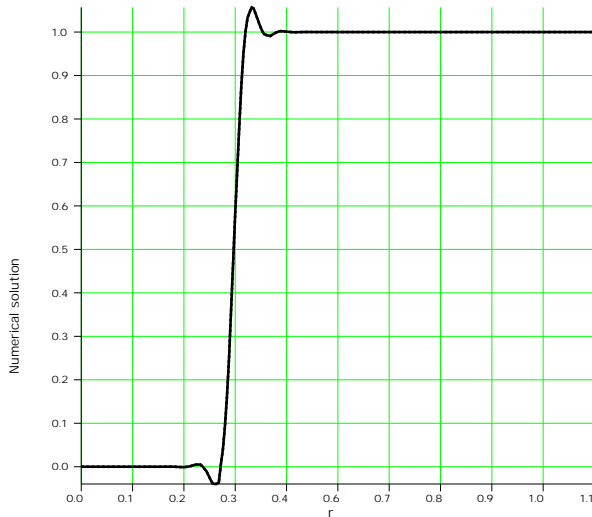


Coupe longitudinale passant par les points
(0 , 0.15) et (1 , 0.65)

Figure 3.7: la solution dans la direction longitudinale avec la méthode SUPG ne présente aucune oscillation.

Pour détecter d'une manière plus visible les oscillations numériques dans ces résultats, nous faisons une coupe longitudinale parallèlement à la direction de la vitesse. Nous obtenons ainsi une courbe représentant la variation de la solution θ_h de (3.23) dans cette coupe (voir Figure 3.7).

Les résultats obtenus ne présentent pas d'oscillations malgré la valeur élevée du nombre de Péclet, ce qui correspond à la diffusion numérique introduite par la méthode SUPG dans la direction longitudinale parallèle à la vitesse. Par contre nous voyons dans la Figure 3.8 que dans la direction transversale i.e. dans la direction orthogonale à la vitesse, la variation de la température présente des oscillations.



Coupe transversale passant par les poi
(0.75 , 0) et (0.25 , 1)

Figure 3.8: la solution dans la direction transversale avec la méthode SUPG

Ce caractère oscillant lié à la méthode SUPG apparaît dans le problème avec convection

dominante; en particulier dans le problème de solidification dans une cellule d'électrolyse où le nombre de Péclet est parfois supérieur à 1000. Puisque la formation du talus est très sensible à ce type d'oscillations, nous avons alors besoin d'un outil numérique capable d'introduire une diffusion numérique supplémentaire à celle provenant de la méthode SUPG. Cet outil est établi pour obtenir une diffusion numérique également dans les directions transverses au champ de vitesse (voir [BeAe02]). Pour tenir compte de ce qui précède, nous ajoutons alors à la formulation (3.23) le terme:

$$\sum_{\underline{K} \in \mathcal{T}_h} \int_{\underline{K}} C_2 \rho C_p \delta_{\underline{K}} \underline{h}_{\underline{K}} \|u\| (\nabla \theta_{\underline{h}}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x}.$$

Nous obtenons ainsi:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \rho C_p (u, \nabla \theta_{\underline{h}}) \varphi_{\underline{h}} d\mathbf{x} + \int_{\Omega} k (\nabla \theta_{\underline{h}}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x} + \\ & \sum_{\underline{K} \in \mathcal{T}_h} \int_{\underline{K}} C_1 \rho C_p \frac{\delta_{\underline{K}} \underline{h}_{\underline{K}}}{\|u\|} (u, \nabla \theta_{\underline{h}}) (u, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x} + \sum_{\underline{K} \in \mathcal{T}_h} \int_{\underline{K}} C_2 \rho C_p \delta_{\underline{K}} \underline{h}_{\underline{K}} \|u\| (\nabla \theta_{\underline{h}}, \nabla \varphi_{\underline{h}}) d\mathbf{x} = 0. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Ici C_2 est une valeur constante positive. Les résultats obtenus sont représentés dans la Figure 3.9:

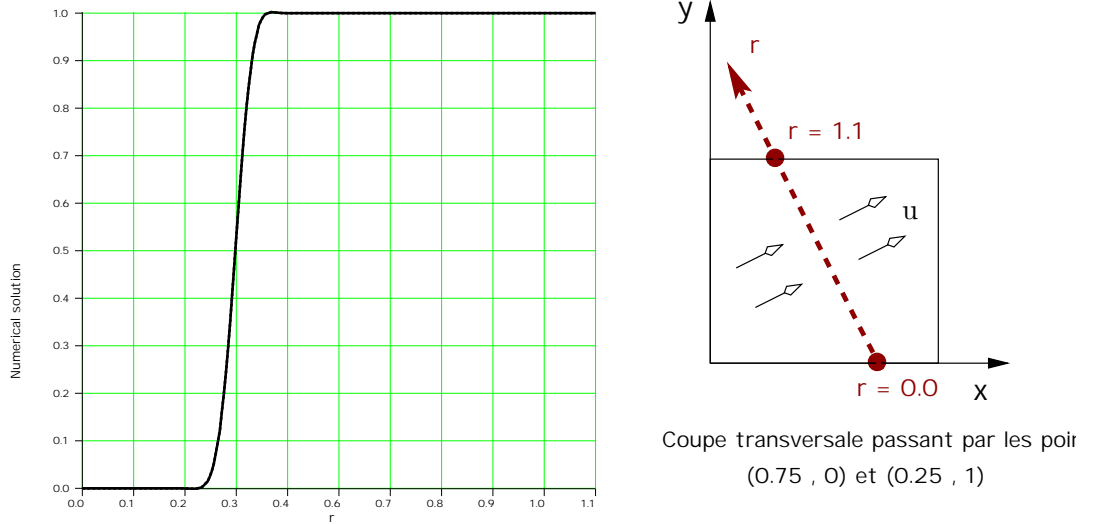


Figure 3.9: la méthode SUPG avec diffusion transverse: pas d'oscillation dans la direction transversale.

Nous noterons que lorsque \underline{h} tend vers zéro, le terme de diffusion ajouté tend aussi vers zéro. La consistance de la méthode de résolution est ainsi maintenue.

3.2 L'équation matricielle du problème thermique

Nous reprenons le problème discret (3.3) – (3.5), en appliquant la méthode SUPG et en faisant une implantation de la diffusion numérique transverse. Ce problème s'écrit sous la forme:

$$S_h^2 \left\{ \begin{aligned} & \int_{\Lambda} \gamma \frac{\tilde{\theta}_h^{m+1} - \beta(H_h^m)}{\tau} \varphi_h d\mathbf{x} + \int_{\Lambda} k^m (\nabla \tilde{\theta}_h^{m+1}, \nabla \varphi_h) d\mathbf{x} \\ & - \int_{\partial\Lambda \setminus \Sigma_1} \alpha (\theta_a - \tilde{\theta}_h^{m+1}) \varphi_h d\Sigma + \int_{\Lambda} \rho C_p (\tilde{u}, \nabla \tilde{\theta}_h^{m+1}) \varphi_h d\mathbf{x} \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \zeta_K \left(\gamma \frac{\tilde{\theta}_h^{m+1} - \beta(H_h^m)}{\tau} + \rho C_p (\tilde{u}, \nabla \tilde{\theta}_h) \right) (\tilde{u}, \nabla \varphi_h) d\mathbf{x} \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} C_2 \int_K \rho C_p \delta_K h_K \|\tilde{u}\| (\nabla \tilde{\theta}_h, \nabla \varphi_h) d\mathbf{x} = \\ & \int_{\Lambda} S^m \varphi_h d\mathbf{x} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \zeta_K S^m (\tilde{u}, \nabla \varphi_h) d\mathbf{x} \end{aligned} \right. \quad \forall \varphi_h \in Y_h^{Th}, \quad (3.25)$$

$$H_h^{m+1} = H_h^m + \gamma (\tilde{\theta}_h^{m+1} - \beta(H_h^m)) \quad \text{dans } \Lambda, \quad (3.26)$$

$$\theta_h^{m+1} = \beta(H_h^{m+1}) \quad \text{dans } \Lambda, \quad (3.27)$$

avec ζ_K donné par:

$$\zeta_K = \begin{cases} C_1 \frac{\delta_K h_K}{\|\tilde{u}\|} & \text{si } \|\tilde{u}\| > 0, \\ 0 & \text{si } \|\tilde{u}\| = 0 \end{cases}$$

et δ_K donné par (3.17).

Compte tenu de (3.1) – (3.2), nous définissons maintenant les quantités suivantes: $\tilde{\Theta}^m$, Θ^m et \mathbb{H}^m , N -vecteurs de composantes $\tilde{\theta}_i^m$, θ_i^m et H_i^m avec $i = 1, 2, \dots, N$ ainsi que \mathbb{A}^m , la $(N \times N)$ matrice de coefficients \mathbb{A}_{ij}^m donnés par:

$$\mathbb{A}_{ij}^m =$$

$$\int_{\Lambda} \frac{\gamma}{\tau} \varphi_j \varphi_i d\mathbf{x} + \int_{\Lambda} k^m (\nabla \varphi_j, \nabla \varphi_i) d\mathbf{x} + \int_{\partial\Lambda \setminus \Sigma_1} \alpha \varphi_j \varphi_i d\Sigma + \int_{\Lambda} \rho C_p (\tilde{u}, \nabla \varphi_j) \varphi_i d\mathbf{x}$$

$$+ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \zeta_K \left(\frac{\gamma}{\tau} \varphi_j + \rho C_p (\tilde{u}, \nabla \varphi_j) \right) (\tilde{u}, \nabla \varphi_i) d\mathbf{x} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} C_2 \int_K \rho C_p \delta_K h_K \|\tilde{u}\| (\nabla \varphi_j, \nabla \varphi_i) d\mathbf{x}$$

et \mathbb{B}^m le N -vecteur de composantes \mathbb{B}_i^m où:

$$\mathbb{B}_i^m =$$

$$\int_{\Lambda} \frac{\gamma}{\tau} \beta(H_h^m) \varphi_i d\mathbf{x} + \int_{\partial\Lambda \setminus \Sigma_1} \alpha \theta_a \varphi_i d\Sigma + \int_{\Lambda} S^m \varphi_i d\mathbf{x} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \zeta_K (S^m + \frac{\gamma}{\tau} \beta(H^m)(\tilde{\mathbf{u}}, \nabla \varphi_i) d\mathbf{x}.$$

La relation entre \mathbb{H}^m et Θ^m peut se mettre sous la forme:

$$\Theta^m = \mathcal{B}(\mathbb{H}^m)$$

où \mathcal{B} est l'application vectorielle qui, à chaque composante \mathbb{H}_i^m associe $\Theta_i^m = \beta(\mathbb{H}_i^m)$.

A l'aide de ces définitions, le système (3.25) – (3.27) peut être formulé de la manière équivalente suivante:

$$S_h^3 \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathbb{A}^m \tilde{\Theta}^{m+1} = \mathbb{B}^m, & (3.28) \\ \mathbb{H}^{m+1} = \mathbb{H}^m + \gamma(\tilde{\Theta}^{m+1} - \mathcal{B}(\mathbb{H}^m)) & \text{dans } \Lambda, & (3.29) \\ \Theta^{m+1} = \mathcal{B}(\mathbb{H}^{m+1}) & \text{dans } \Lambda. & (3.30) \end{array} \right.$$

La matrice \mathbb{A}^m est non symétrique. Dans nos applications elle est d'ordre environ 2.10^5 et de taille (177465×177465) . Notons que dans le cas d'un problème thermique sans convection (fluide sans vitesse), la matrice \mathbb{A}^m est symétrique définie positive. A noter aussi que nous utilisons une matrice de masse “lumpée” dans la construction de \mathbb{A}^m . Il est clair que chaque itération (m) du schéma de Chernoff fait appel à la résolution du système matriciel (3.28); les méthodes utilisées pour cette résolution sont introduites dans le paragraphe qui suit.

Des détails sur la mise sous forme matricielle des systèmes d'équations liés aux problèmes électromagnétique (EM) et hydrodynamique (HD) peuvent être trouvés dans [RaT98]. Mentionnons que le problème S_{EM}^m lié à l'électromagnétisme de la section (2.5) du chapitre 2 est résolu numériquement avec la même géométrie que celle du problème thermique, avec le même maillage. La discrétisation numérique spatiale de ce problème conduit ainsi à résoudre un système ayant une matrice symétrique définie positive et de même taille que la matrice (\mathbb{A}^m). Tandis que le problème S_{HD}^m lié à l'hydrodynamique (voir chapitre 2, section 2.5), est résolu numériquement dans une partie restreinte de la cuve formée du domaine fluide et du talus. Une matrice non symétrique est ainsi obtenue suite à la discrétisation spatiale de ce problème.

Résolution du système matriciel

La description du système matriciel étant faite, nous résolvons ce système en utilisant les trois méthodes itératives suivantes:

- GC: gradient conjugué pour les matrices symétriques définies positives.
- GMRES: avec préconditionnement de type diagonal ou ILU(0).

- AMG: “algebraic multigrid method” pour les matrices symétriques définies positives.

Nous noterons que la méthode AMG est une méthode algébrique qui fait appel à l’agglomération des noeuds du maillage. Dans ce paragraphe nous ne présentons pas la description des deux méthodes itératives GC et GMRES. Le lecteur intéressé pourra consulter [YSA96]. Par contre nous introduisons une description résumée de la méthode AMG sans présenter l’étude de convergence de cette méthode qui est introduite dans [VMB96] et dans [AIJ02](Ch II, §3).

Les méthodes multigrilles sur les maillages non-structurés peuvent être classées en deux groupes. Le premier groupe comprend les méthodes multigrilles géométriques qui utilisent une hiérarchie de maillages d’échelles différentes pour le même domaine de calcul. Néanmoins pour ces méthodes, la nécessité de stocker et gérer plusieurs maillages de la même géométrie est un gros désavantage. De plus le “déaffinement” par rediscrétisation du maillage 3D reste toujours une tâche extrêmement difficile et complexe.

Le second groupe de méthodes, qui comprend celle que nous utilisons dans notre calcul, essaie d’éviter les complexités géométriques associées à la gestion, en parallèle, d’une hiérarchie de maillages et construit la procédure multigrille sur des concepts purement algébriques.

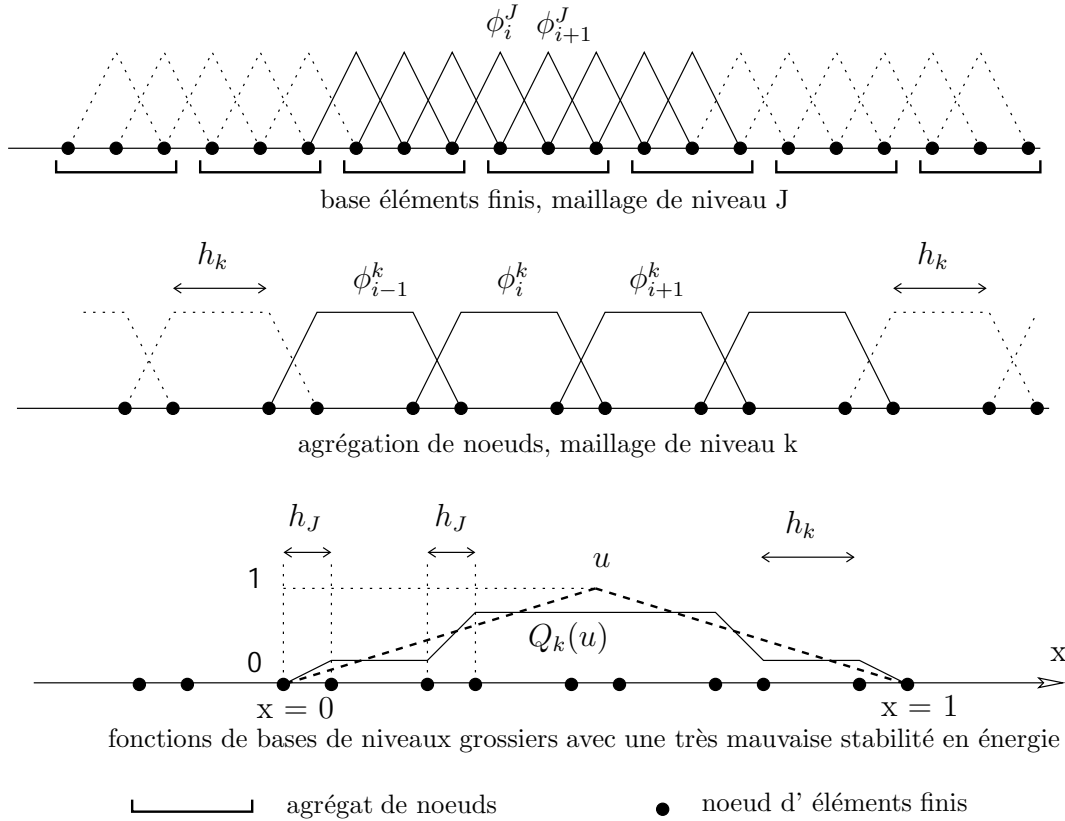


Figure 3.10: technique d’agrégation dans la méthode AMG

Dans la méthode multigrille géométrique, la hiérarchie des maillages et des opérateurs de prolongement est basée sur la rediscrétisation du domaine. A l’opposé l’approche algébrique essaie de construire une hiérarchie d’espaces grossiers (ou dans le cadre variationnel d’opérateur de prolongement) uniquement à partir de la matrice du problème correspondant au niveau le plus fin.

L’avantage principal de cette méthode est qu’elle procède par agrégation des degrés de liberté pour construire les problèmes grossiers seulement à partir des données et du maillage de niveau le plus fin (voir Figure 3.10).

Désignons par ϕ_i^k les fonctions de base de l’espace fonctionnel de Hilbert M_k qui est l’espace des solutions numériques correspondant au niveau d’agrégation (k), avec $1 \leq k \leq J$, où M_J est l’espace de niveau le plus fin et M_1 est l’espace de niveau le plus grossier, $M_{k-1} \subset M_k \subset \dots \subset M_J$. Nous voyons clairement que tandis que la base de niveau le plus fin peut approcher exactement n’importe quelle fonction “chapeau”, les niveaux grossiers ne contiennent pas la fonction “chapeau”.

De plus la théorie de convergence de la méthode multigrille exige une propriété de stabilité en énergie de l’espace grossier (voir [BpWx91] et [BrPa93]) ce qui n’est pas satisfait dans la situation de la Figure 3.10. Pour mettre en évidence ce problème nous résolvons le problème de Poisson:

$$-\Delta u = f \text{ dans } \Omega,$$

$$u = 0 \text{ sur } \partial\Omega,$$

en cherchant une solution numérique $u \in M_J$, c. à. d. en cherchant $u \in M_J$ tel que pour tout $v \in M_J$:

$$A(u,v) = (f,v)_0 \text{ dans } \Omega,$$

où $A(.,.)$ est le semi-produit scalaire H^1 usuel et $(.,.)_0$ est le produit scalaire L^2 . Ici on suppose $f \in L^2(\Omega)$. Nous notons par (h_k) la taille de l’agrégat au niveau (k) (voir Figure 3.10). Nous définissons la projection L^2 de $H^1(\Omega)$ dans M_k , notée Q_k . La condition de stabilité en énergie de l’espace M_k est donnée par l’existence d’une constante C indépendante de h_k telle que pour tout $u \in H_0^1(\Omega)$:

$$|Q_k u|_{1,\Omega} \leq C |u|_{1,\Omega}. \quad (3.31)$$

Ici $|\cdot|_{1,\Omega}$ est la semi-norme H^1 , c’est-à-dire $|v|_{1,\Omega} = A(v,v)^{\frac{1}{2}}$.

Dans la Figure 3.10 nous donnons un exemple de fonction $u \in H^1(\Omega)$ pour laquelle la condition (3.31) n’est pas vérifiée. En effet, l’énergie de la fonction u est:

$$|u|_{1,\Omega}^2 = \int_0^1 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 dx = \int_0^1 \left(\frac{1}{0.5} \right)^2 dx = 4,$$

l’énergie de la fonction projetée $Q_k u$ est de l’ordre de:

$$|Q_k u|_{1,\Omega}^2 = \int_0^1 \left(\frac{\partial Q_k u}{\partial x} \right)^2 dx \approx C \left(\frac{1}{h_J} \right)^2 h_J = C \left(\frac{1}{h_J} \right).$$

Par conséquent, la constante C est de l'ordre de $h_J^{-\frac{1}{2}}$, ce qui contredit les hypothèses nécessaires pour la théorie de la convergence multigrille.

Au vu de ce qui précède les méthodes d'agrégation ont été améliorées par l'introduction du concept d'agrégation lissée, qui consiste à améliorer la base de l'espace grossier par un processus de lissage conçu de manière à ce qu'il réalise les buts suivants:

- réaliser l'approximation des fonctions “chapeau” par les fonctions de base lissées qui correspondent au niveau grossier.
- satisfaire la condition de stabilité en énergie de l'espace grossier (voir Figure 3.11).

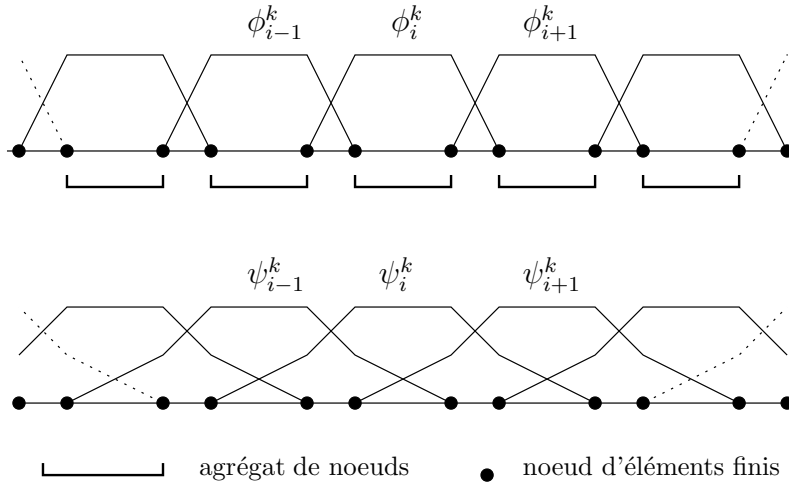


Figure 3.11: lissage de base de niveaux grossiers

Supposons que nous résolvions le système suivant provenant de la discrétisation par éléments finis avec un pas du maillage (h):

$$A_h \mathbf{u}_h = b_h.$$

Alors l'algorithme de la résolution itérative par AMG s'écrit de la façon suivante:

Soit $b_J = b_h$, $A_J = A_h$, J étant le nombre de niveaux multigrilles. Imposons $\mathbf{u}_J = 0$ et exécutons:

1. Pré-lissage: $\mathbf{u}_J \leftarrow (I - R_J A_J) \mathbf{u}_J + R_J b_J$, où R_J est un préconditionneur d'une simple méthode itérative (par exemple Gauss-Seidel ou Jacobi).

2. Correction de grille grossière: si $J > 1$,

(a) Faire une restriction du résidu $r_J = b_J - A_J \mathbf{u}_J$ et le mettre à la place du second membre du niveau grossier $b_{J-1} = I_{J-1}^J r_J$.

(b) Résoudre pour \mathbf{u}_{J-1} sur le niveau grossier $A_{J-1} \mathbf{u}_{J-1} = b_{J-1}$ par une application récursive de cet algorithme sur le niveau grossier ($J-1$).

(c) Opérer le prolongement: corriger \mathbf{u}_J par $\mathbf{u}_J \leftarrow \mathbf{u}_J + I_J^{J-1} \mathbf{u}_{J-1}$.

3. Post-Lissage: $\mathbf{u}_J \leftarrow (I - R_J A_J) \mathbf{u}_J + R_J b_J$.

4. Imposer $\mathbf{u}_h = \mathbf{u}_J$.

Dans le cadre de cet algorithme nous utilisons des opérateurs de transfert entre les niveaux multigrilles, notamment la restriction $I_{k-1}^k : M_k \rightarrow M_{k-1}$ et le prolongement $I_k^{k-1} : M_{k-1} \rightarrow M_k$ et des séries d'opérateurs sur les niveaux grossiers $A_k : M_k \rightarrow M_k$.

Mentionnons que l'avantage de la méthode AMG est le suivant: la vitesse de convergence de la résolution itérative est indépendante de la taille h de la maille (voir [AlJ02] Ch IV, §2), et par conséquent le temps CPU est d'ordre $O(\mathbf{n})$ où \mathbf{n} est le nombre d'inconnues du problème. Une comparaison entre la méthode AMG et d'autres types de méthode multigrille d'une part et la méthode du gradient conjugué CG d'autre part est effectuée dans [ADa02]. Cette comparaison montre que le temps CPU relatif à l'usage de AMG est plus avantageux que celui de CG.

Notons en plus que cette méthode est très efficace dans le cas d'un problème avec mauvais conditionnement matriciel provenant de l'anisotropie du maillage ou de la complexité géométrique du domaine. Cette méthode est aussi efficace dans le cas d'un problème de Laplace mal conditionné où les conditions de Dirichlet sont imposées sur une partie relativement "petite" du bord (voir par exemple [AlJ99]).

Nous utilisons GMRES pour la résolution du problème hydrodynamique (S_{HD}^m) et de la thermique (S_{Th}^m) (voir section 2.5 ch 2). Par contre nous utilisons AMG et GC pour la résolution du problème électrique (S_{EM}^m) et du problème thermique sans convection.

L'étude des performances de ces méthodes est présentée au chapitre 4.

3.3 Validations numériques

Afin de valider le schéma numérique, dit de Chernoff, mis en place pour résoudre le problème thermique et pour mettre en évidence ses propriétés de convergence pour différentes valeurs du paramètre de relaxation γ , nous introduisons dans cette section deux cas tests relatifs aux problèmes thermiques avec et sans convection. Ces deux cas tests sont considérés dans un cadre théorique.

Présentation du cas test I: vitesse nulle.

Nous effectuons un calcul thermique de la solidification. Un calcul comparable à celui-ci a été présenté dans [Gre91] et [Mas03] dans un cadre bidimensionnel basé sur l'existence d'une solution exacte connue.

Le domaine de calcul est un cube $\Omega =]-1,1[^3$. La discrétisation spatiale du domaine utilise un maillage structuré obtenu en divisant Ω en hexaèdres cubiques de même taille et en coupant chaque cube en 6 tétraèdres. Pour mesurer les erreurs des solutions numériques, relativement aux solutions exactes, nous utilisons la norme L^2 notée $\|\cdot\| \equiv \|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$ et la

norme L^2 intégrée en temps, notée $\|\cdot\|_T \equiv \|\cdot\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}$.

Pour obtenir l'ordre de convergence, nous calculons ces normes pour la différence entre la solution obtenue pour l'enthalpie exacte notée H_e , (respectivement θ_e pour la température) et la solution approchée, notée H_h , (respectivement θ_h pour la température) obtenue en utilisant le schéma de Chernoff.

Tous les calculs sont effectués en utilisant une relation, entre les pas d'espace et les pas de temps de type $\tau = h^2$. Ce test est effectué dans l'intervalle de temps $[0, T]$ avec $T = 0.25$ s en faisant varier le paramètre de relaxation γ du schéma de Chernoff.

Les propriétés thermiques sont supposées constantes dans chaque phase. La fonction enthalpie-température β est définie par:

$$\beta(\lambda) = \begin{cases} \alpha_1 \lambda & \text{si } \lambda < 0, \\ 0 & \text{si } 0 \leq \lambda \leq \ell, \\ \alpha_2(\lambda - \ell) & \text{si } \lambda > \ell, \end{cases}$$

où les différents coefficients ont les valeurs suivantes: $\alpha_1 = \frac{1}{2}$, $\alpha_2 = \frac{1}{3}$ et $\ell = 1$. Dans ce cas test, il est clair que la valeur maximale pour le paramètre de relaxation, qui satisfait le critère de stabilité du schéma de Chernoff, est $\gamma = 2.0$.

L'enthalpie exacte est définie par:

$$H_e(x, y, z, t) = \begin{cases} 6\phi(x, y, z, t) + \ell & \text{si } \phi(x, y, z, t) \geq 0, \\ 2\phi(x, y, z, t) & \text{si } \phi(x, y, z, t) < 0, \end{cases}$$

où $\phi(x, y, z, t) := x^2 + y^2 + z^2 - \frac{1}{4}e^{-4t} = 0$ désigne l'interface solide-liquide.

En posant $k = 1$ pour la conductivité thermique, l'enthalpie approchée est alors solution du problème suivant:

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \Delta \beta(H) = f \quad \text{dans } \Omega \times (0, T),$$

$$H = \begin{cases} 6\phi + l & \text{si } \phi \geq 0 \\ 2\phi & \text{si } \phi < 0 \end{cases} \quad \text{sur } \partial\Omega \times (0, T),$$

$$H(., 0) = \begin{cases} 6\phi(., 0) + l & \text{si } \phi(., 0) \geq 0 \\ 2\phi(., 0) & \text{si } \phi(., 0) < 0 \end{cases} \quad \text{dans } \Omega,$$

avec le second membre:

$$f(x,y,z,t) = \begin{cases} 6e^{-4t} - 12 & \text{si } \phi \geq 0, \\ 2e^{-4t} - 6 & \text{si } \phi < 0. \end{cases}$$

Notons que ce problème satisfait la condition déjà introduite dans le chapitre 2 section 4, pour la vitesse d'avancement v_a du front de solidification. Cette condition est donnée par la relation:

$$v_a \cdot \{H\}_\Delta = \{((-k\nabla\beta(H)), n)\}_\Delta,$$

où Δ désigne le front de solidification, n est le vecteur unitaire normal à Δ sortant du sous-domaine solide et où $\{.\}_\Delta$ désigne le saut de la grandeur correspondante en direction n . En effet, le front de solidification défini par $\phi = 0$, i.e. $r = \frac{1}{2}e^{-2t}$ avec $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, avance avec une vitesse $\dot{r}(t) = \frac{\partial r}{\partial t} = -e^{-2t}$.

Le saut d'enthalpie est donné par: $\{H\}_\Delta = \ell = 1$, et

$$\begin{aligned} \{((-k\nabla\beta(H)), n)\}_\Delta &= \left\{-\frac{\partial\beta(H)}{\partial n}\right\}_\Delta = \left\{-\frac{\partial\beta(H)}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial\phi} \frac{\partial\phi}{\partial n}\right\}_\Delta \\ &= \left(\frac{\partial\beta(H)}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial\phi} \frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_{\phi=0^+} - \left(\frac{\partial\beta(H)}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial\phi} \frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_{\phi=0^-} = \alpha_2 \cdot 6 \cdot e^{-2t} - \alpha_1 \cdot 2 \cdot e^{-2t} = e^{-2t}. \end{aligned}$$

Présentation des résultats obtenus

Nous introduisons les notations suivantes:

N-el = Nombre d'éléments,

N-no = Nombre de noeuds,

N-it = Nombre de pas de temps,

CPU = Le temps CPU correspondant en secondes (station Pentium(R) 4, CPU 2.80GHz)

- Résultats pour $\gamma = 0.10$:

N-el	N-no	h	N-it	$\ H_e - H_h\ $	$\ H_e - H_h\ _T$	$\ \theta_e - \theta_h\ $	$\ \theta_e - \theta_h\ _T$	CPU
384	125	1/4	4	0.933	0.401	0.295	0.127	3.39
3072	729	1/8	16	0.707	0.275	0.218	0.085	48.55
24576	4913	1/16	64	0.375	0.163	0.109	0.047	1416.51
196608	35937	1/32	256	0.154	0.079	0.037	0.019	50682.42

Tableau: 3.1: erreur sur les résultats numériques et temps CPU pour $\gamma = 0.10$

- Résultats pour $\gamma = 0.25$:

N-el	N-no	h	N-it	$\ H_e - H_h\ $	$\ H_e - H_h\ _T$	$\ \theta_e - \theta_h\ $	$\ \theta_e - \theta_h\ _T$	CPU
384	125	1/4	4	0.847	0.378	0.267	0.120	3.27
3072	729	1/8	16	0.511	0.222	0.155	0.068	49.12
24576	4913	1/16	64	0.228	0.113	0.064	0.032	1389.83
196608	35937	1/32	256	0.111	0.058	0.027	0.014	51373.75

Tableau: 3.2: erreur sur les résultats numériques et temps CPU pour $\gamma = 0.25$

- Résultats pour $\gamma = 2.00$:

N-el	N-no	h	N-it	$\ H_e - H_h\ $	$\ H_e - H_h\ _T$	$\ \theta_e - \theta_h\ $	$\ \theta_e - \theta_h\ _T$	CPU
384	125	1/4	4	0.651	0.326	0.213	0.106	3.31
3072	729	1/8	16	0.322	0.163	0.104	0.052	48.54
24576	4913	1/16	64	0.164	0.084	0.051	0.026	1395.01
196608	35937	1/32	256	0.085	0.044	0.026	0.013	51359.55

Tableau: 3.3: erreur sur les résultats numériques et temps CPU pour $\gamma = 2.00$

Nous désignons par E_H^h la quantité $\|H_e - H_h\|_T$ et par E_θ^h la quantité $\|\theta_e - \theta_h\|_T$. Si nous supposons que $E_H^h = Ch^{a_H}$ et $E_\theta^h = \tilde{C}h^{a_\theta}$, alors:

$$a_H = \frac{\log(E_H^{h_1}/E_H^{h_2})}{\log(h_1/h_2)} = \text{ordre de convergence en norme } \|\cdot\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \text{ pour l'enthalpie,}$$

et

$$a_\theta = \frac{\log(E_\theta^{h_1}/E_\theta^{h_2})}{\log(h_1/h_2)} = \text{ordre de convergence en norme } \|\cdot\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \text{ pour la température,}$$

où h_1 et h_2 sont deux valeurs différentes de la taille de maillage qui correspondent à deux valeurs différentes de E_θ^h et E_H^h .

A partir des données figurant dans les tableaux ci-dessus, nous pouvons répertorier, dans le Tableau 3.4, les ordres de convergence a_θ et a_H en fonction de différentes valeurs de γ :

γ	0.10	0.25	2.00
a_H	0.781	0.901	0.963
a_θ	0.914	1.033	1.009

Tableau: 3.4: les ordres de convergence

Les résultats obtenus montrent qu'il y a bien convergence de la solution numérique vers la solution exacte. D'autre part que plus le paramètre de relaxation est proche de sa valeur limite maximale, meilleure sera l'approximation de la solution exacte. Les résultats obtenus sont conformes aux résultats donnés par P. A. Gremaud [Gre91].

Présentation du cas test II: vitesse non nulle.

Dans ce cas test, qui se présente dans un cadre tridimensionnel $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, nous introduisons le phénomène de convection thermique. Nous supposons que la chaleur latente de fusion est nulle, i.e. que la courbe température enthalpie ne présente pas de saut. Tous les calculs sont effectués en utilisant une relation, entre les pas d'espace et les pas de temps de type $\tau = Ch^2$, où C est une constante. Nous effectuons ce test en choisissant l'intervalle de temps $[0, T]$ avec $T = 1s$.

Le domaine de calcul est un carré $\Omega = (0,1)^3$. La discrétisation spatiale utilise des maillages isotrope obtenu en divisant le domaine de calcul en cubes de même taille et en coupant chaque cube en 24 tétraèdres, cette subdivision tétraédrique est effectuée après l'implémentation de nouveaux noeuds au centre de chaque cube et au centre de chaque face de celui-ci. Afin d'estimer l'erreur, nous calculons la norme L^2 , notée $\|\cdot\|$ et la semi-norm H^1 , notée $\|\nabla\cdot\|$ ($\equiv |\cdot|_{H^1}$), de la différence entre la solution exacte et la solution approchée. Nous faisons les mêmes hypothèses que dans le cas test I en ce qui concerne les propriétés thermiques; elle sont supposées constantes dans chaque phase. De plus nous considérons que la densité volumique ρ , la chaleur spécifique C_p et la conductivité thermique $k = 1$ sont constantes et égales à 1. La fonction enthalpie-température β est définie par:

$$\beta(\lambda) = \lambda.$$

Il est clair que la valeur maximale du paramètre de relaxation pour laquelle le critère de stabilité du schéma de Chernoff est satisfait a la valeur $\gamma = 1.0$.

La solution exacte pour l'enthalpie sera définie par:

$$H_e(x,y,z,t) = \sin((1+2x)\frac{\pi}{2})\cos(\pi y)\cos(2\pi z)e^{-\frac{t}{25}},$$

où $H_e(x,y,z,t) = 0.15$ est la valeur de l'enthalpie correspondant au changement de phase.

L'enthalpie approchée est alors solution du problème suivant:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial t} + (\mathbf{u}, \nabla H) - \Delta \beta(H) &= f && \text{dans } \Omega \times (0, T), \\ \frac{\partial H}{\partial n} &= 0 && \text{sur } \partial\Omega \times (0, T), \\ H(., 0) &= \sin((1+2x)\frac{\pi}{2})\cos(\pi y)\cos(2\pi z) && \text{dans } \Omega, \end{aligned}$$

où le second membre f est donné par:

$$f(x,y,t) = -\frac{1}{25}H_e + 6\pi^2 H_e + (\mathbf{u}, \nabla H_e),$$

et le champ de vitesse \mathbf{u} par:

$$\mathbf{u} = \begin{cases} (1,1,1) & \text{si } H_e > 0.15, \\ (0,0,0) & \text{si } H_e \leq 0.15. \end{cases}$$

Nous notons (comme dans le cas test I) que la relation entre la vitesse d'avancement v_a du front de solidification Δ , et le saut du flux thermique est satisfaite i.e.

$$v_a \cdot \{H\}_\Delta = \{((-k\nabla\beta(H) + \rho C_p \mathbf{u}), n)\}_\Delta.$$

En effet:

$$\{H\}_\Delta = \ell = 0.$$

De plus:

$$\begin{aligned} \{((-k\nabla\beta(H) + \rho C_p \mathbf{u}), n)\}_\Delta &= \left\{-\frac{\partial\beta(H)}{\partial n}\right\}_\Delta \\ &= \{-(\nabla H, n)\}_\Delta = 0 \end{aligned}$$

Présentation des résultats obtenus

Ce problème est résolu en utilisant la relation ($\tau = 16h^2$). La solution numérique de ce problème à l'instant "t = 1 seconde" pour une taille de maillage $h = 1/64$ est présentée dans la Figure 3.12.

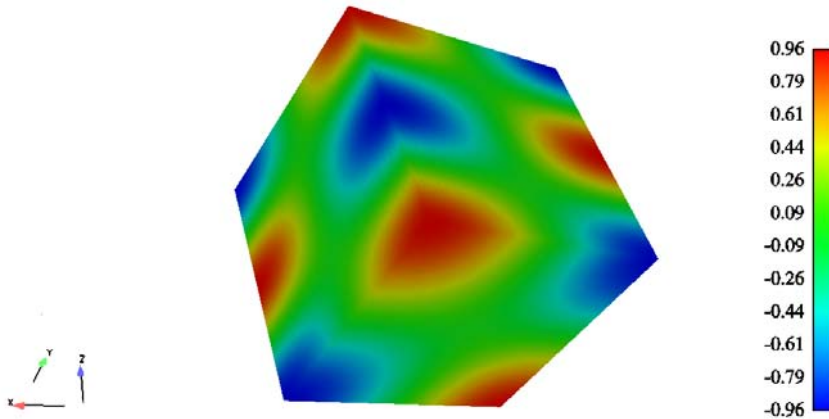


Figure 3.12: l'approximation du champ de la température pour $h = 1/64$

Les résultats obtenus pour l'ordre de la convergence dans ce cas test figurent dans le tableau suivant:

N-el	h	N-it	$\ H_e - H_h\ $	$\ \nabla H_e - \nabla H_h\ $	CPU "Second"	Memoire "MB"
192	1/4	1	1.927×10^{-1}	1.574	1	50.033
1536	1/8	4	5.963×10^{-2}	0.817	5	50.177
12288	1/16	16	1.521×10^{-2}	0.406	80	51.252
98304	1/32	64	3.817×10^{-3}	0.203	2657	60.755
786432	1/64	256	9.553×10^{-3}	0.101	169822	199.386

Tableau 3.5: ordre de convergence

où N-it est le nombre d'itérations de schéma de Chernoff. Nous désignons par E^h la quantité $\|H_e - H_h\|$ et par \tilde{E}^h la quantité $\|\nabla H_e - \nabla H_h\|$. Si nous supposons que $E^h = Ch^a$ et $\tilde{E}^h = \tilde{C}h^{\tilde{a}}$, il s'en suit:

$$a = \frac{\log(E^{h_1}/E^{h_2})}{\log(h_1/h_2)} = \text{ordre de convergence en norme } L^2,$$

et

$$\tilde{a} = \frac{\log(\tilde{E}^{h_1}/\tilde{E}^{h_2})}{\log(h_1/h_2)} = \text{ordre de convergence en semi-norme } H^1,$$

où h_1 et h_2 sont deux valeurs différentes de la taille de maillage qui correspondent à deux valeurs différentes de E^h et \tilde{E}^h .

A partir des données figurant dans le tableau ci-dessus, il est facile de trouver que $a = 2$ et $\tilde{a} = 1$. Ces résultats sont conformes aux estimations théoriques pour un tel type de problèmes où l'ordre de convergence est en $\mathcal{O}(\tau + h^2)$ pour la norme L^2 et en $\mathcal{O}(\tau + h)$ pour la semi-norme H^1 .

Les tests que nous avons présentés, permettent de valider la programmation du problème thermique effectuée et de montrer la possibilité de coupler celui-ci avec le calcul MHD dans le logiciel ALUCCELL.

Chapitre 4

Simulations numériques de problèmes industriels

Le but de ce chapitre est de présenter des résultats numériques dans un contexte industriel.

La première section est consacrée à l'introduction des calculs électro-thermiques sans couplage avec l'hydrodynamique. Une comparaison avec d'autres résultats provenant de calculs effectués par le logiciel "ANSYS" est proposée lorsqu'une partie de la cuve est considérée. Nous présentons également des résultats du calcul électro-thermique appliqué à la situation réelle d'une cuve prise dans son intégralité.

Dans la deuxième section de ce chapitre nous prenons en compte le champ des vitesses dans le calcul électro-thermique et nous établissons alors un couplage MHD-Thermique. Le calcul est effectué dans la cuve entière. Des résultats numériques sont ainsi présentés.

4.1 Simulations du problème industriel sans couplage avec l'hydrodynamique

Dans cette section nous introduisons les conditions générales sous lesquelles les simulations ont été effectuées (coefficients de transfert thermique et conductivité artificielle) ainsi que les propriétés physiques des matériaux intervenant dans la simulation. Nous donnons les principaux résultats qui en découlent.

4.1.1 Modèle de la tranche

Une simulation numérique du problème couplé électro-thermique est traitée dans une partie de la cuve (slice model). L'importance du calcul introduit est double. Il représente d'une part une étape importante de l'adaptation du logiciel à la situation industrielle et d'autre part il permet de valider la fiabilité de ce logiciel à l'aide de comparaisons avec les résultats provenant du logiciel "ANSYS" utilisé à "Warsaw Technical University".

Géométrie et maillage:

Comme nous l'avons déjà indiqué, le calcul électro-thermique à vitesse nulle est effectué

dans une partie limitée de la cuve (slice model) que nous appelons “tranche”. Nous désignons par “Ox”, “Oy” et “Oz” les axes d’un repère orthonormé d’origine “O” située au centre de la cuve et nous considérons que la géométrie de la cellule d’électrolyse est symétrique par rapport aux plans “ $z = 0$ ” et “ $x = 0$ ” (voir Figure 4.1).

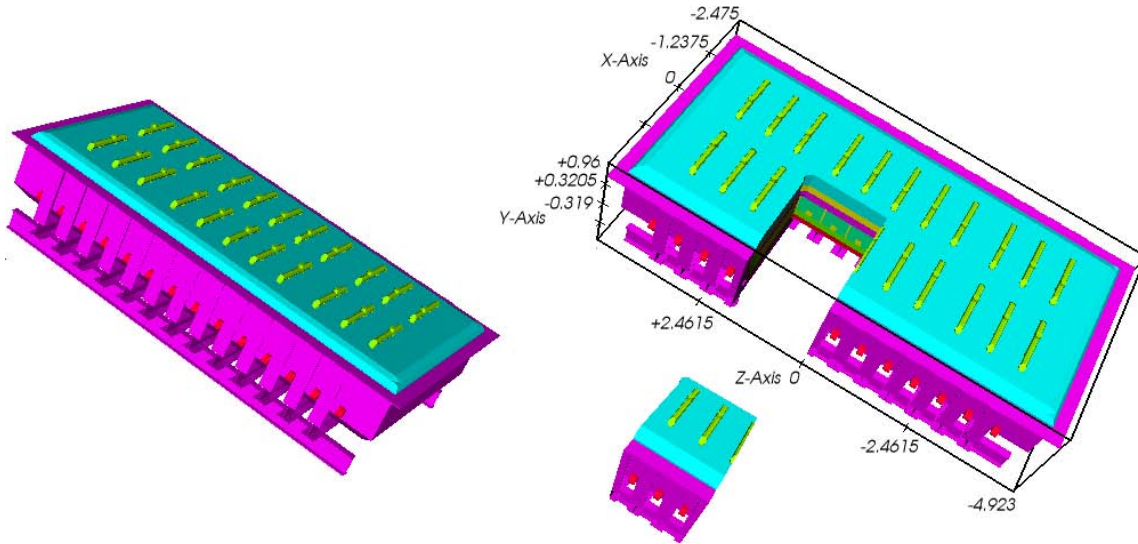


Figure 4.1: la cuve dans laquelle la tranche est découpée

Cette tranche est obtenue en faisant trois coupes: une longitudinale située dans le plan “ $x = 0$ ” et deux transversales selon les plans “ $z = 0$ ” et “ $z = 1.79$ m”. Dans la Figure 4.2 nous voyons deux perspectives géométriques correspondant à cette partie de la cuve.

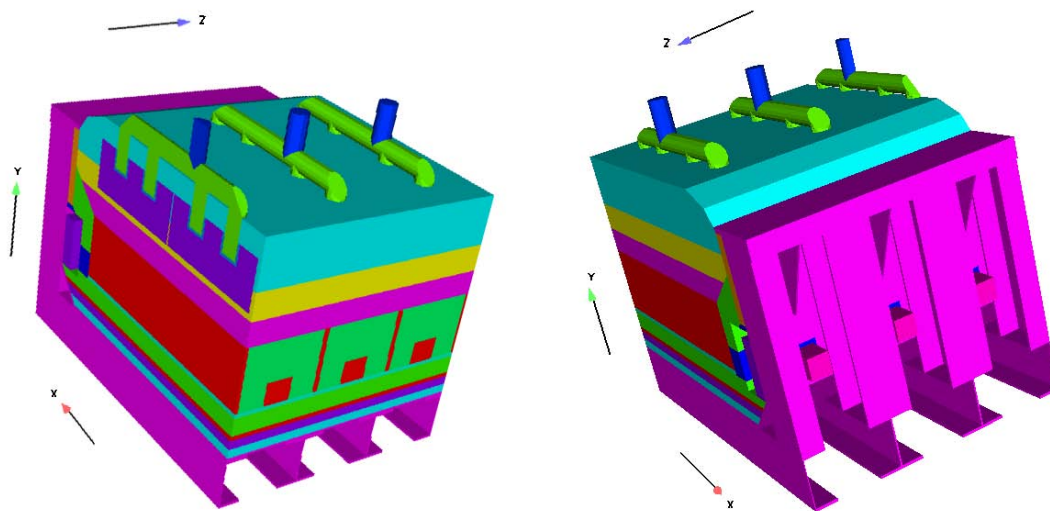


Figure 4.2: la tranche

Le domaine de calcul est formé de 23 sous-domaines représentés dans la Figure 4.5 et dans le Tableau 4.1 donnés plus loin. Comme indiqué dans la Figure 4.2, ce domaine contient 2.5 blocs anodiques et 3 blocs cathodiques. Le maillage de cette tranche est effectué dans une première étape par une subdivision hexaédrique avec le logiciel ANSYS. Dans une deuxième étape nous utilisons le mailleur du logiciel ALUCCELL qui subdivise chaque élément hexaédrique en 5 tétraèdres à l'aide d'un algorithme qui garantit la conformité du maillage.

Nous faisons l'hypothèse que le contact thermo-électrique est parfait entre les sous-domaines constituant la tranche (le champ de température et celui de potentiel électrique sont continus). Nous n'avons donc pas introduit de doubles noeuds aux interfaces entre ces matériaux pour décrire le saut de la température ou du potentiel électrique. Le maillage est ainsi constitué de 235080 tétraèdres et 45259 noeuds y compris 11492 noeuds situés dans la partie liquide de la tranche i.e. parties 8 et 9 dans la Figure 4.5.

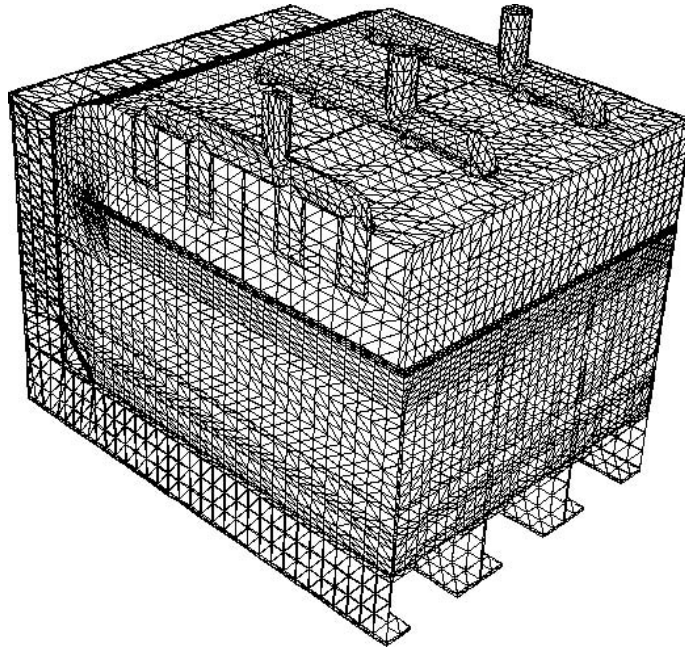


Figure 4.3: le maillage tétraédrique de la tranche

Hypothèses de simulation:

Comme déjà mentionné plus haut, le calcul est effectué sous l'hypothèse que la vitesse est nulle et en tenant compte de la continuité de la température et du potentiel électrique aux interfaces entre les matériaux. Avec la symétrie imposée dans le paragraphe précédent, nous imposons des conditions d'isolation thermique et électrique sur les parties du bord situées selon les deux plans de symétrie " $x = 0$ " et " $z = 0$ " indiqués précédemment. Nous faisons l'hypothèse que le gradient de la température et celui du potentiel électrique sont simultanément négligeables selon la direction " Oz ", ce qui permet d'imposer des conditions

d'isolation thermique et électrique sur la partie du bord située selon le plan “ $z = 1.79 \text{ m}$ ”.

Remarque 4.1: Une validation des conditions de bord ci-dessus par rapport au comportement thermo-électrique de la cuve n'était possible qu'après des observations expérimentales. Grâce au calcul électro-thermique global d'une cuve dans son intégralité présenté dans les parties suivantes, nous pouvons comparer les résultats obtenus par le calcul global avec ceux obtenus par le calcul limité dans la tranche, pour juger le bien-fondé de ces conditions limites imposées sur la tranche.

Le problème électrique est résolu en imposant une densité de courant uniformément répartie sur les têtes des tiges anodiques. Cette densité est estimée en considérant que le courant total I traversant la cuve est également distribué sur les 22 tiges anodiques. La densité du courant est alors égale à $I/22$ divisé par la surface de la section d'une tige anodique. Une condition de Dirichlet sur le potentiel électrique “voltage = 0” est imposée sur la partie du bord située aux extrémités des barres collectrices. (voir Figure 4.4)

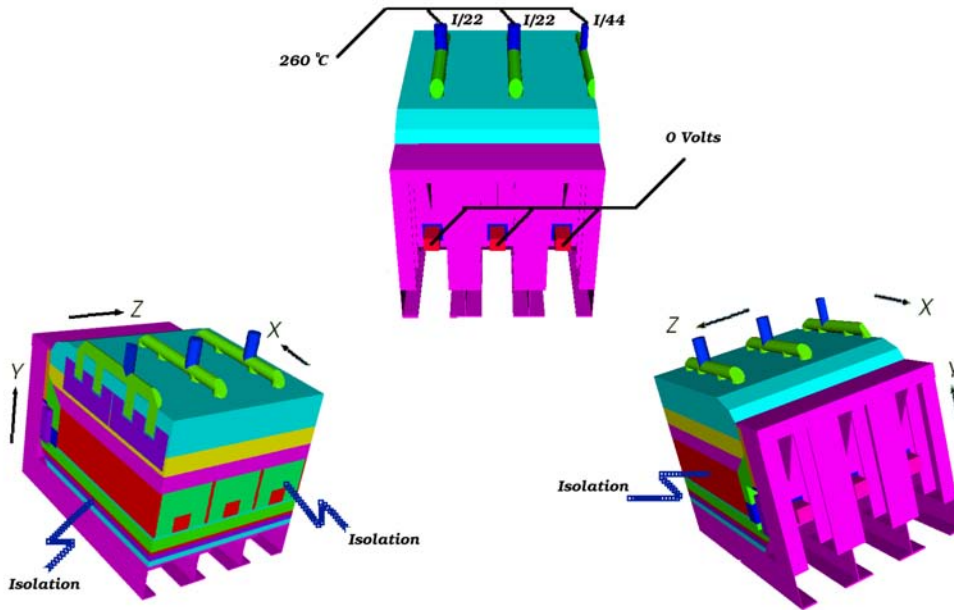


Figure 4.4: conditions de bord thermo-électriques

Dans les parties isolantes du domaine nous imposons une valeur de la conductivité électrique relativement faible et de l'ordre de $10^{-2}(\text{ohm.m})^{-1}$ qui sera justifiée numériquement dans la suite. Cette valeur qui est négligeable par comparaison avec celle des parties conductrices, est fixée de manière à ce que le calcul ne présente aucune sensibilité au choix des valeurs plus faibles. Par contre le problème thermique est résolu en posant une condition de Dirichlet $\theta = 260 \text{ °C}$ sur les têtes des tiges anodiques.

Sur les parties du bord qui ne sont pas situées dans les plans de coupes déjà indiqués,

une hypothèse de transfert thermique par convection et radiation est introduite. La radiation est prise en compte implicitement dans l'estimation du coefficient de convection thermique équivalent qui dépend de la température au bord et qui est donnée par la formule expérimentale:

$$\alpha(\theta) = c_1 + c_2(\theta - c_3) \quad \text{W/m}^2 \cdot ^\circ\text{C} \quad (4.1)$$

où c_1 , c_2 et c_3 sont des valeurs positives fixées expérimentalement par l'industrie. Pratiquement ces coefficients, ainsi que le courant total I , sont tels que: $5 < c_1 < 9$, $0.05 < c_2 < 0.10$, $75 < c_3 < 125$ et $170 < I < 190$ KA.

La température de l'air θ_a à l'extérieur de la cuve est supposée égale à 50°C .

Dans ce modèle statique où le fluide est considéré en l'absence de mouvements, nous tenons compte de l'effet convectif dû à la vitesse en imposant une valeur de conductivité thermique artificielle k_a pour le fluide au lieu de la conductivité réelle $k = 1.2 \text{ W/m} \cdot ^\circ\text{C}$. Pratiquement k_a satisfait l'inégalité: $1800 < k_a < 2300 \text{ W/m} \cdot ^\circ\text{C}$.

La source thermique est considérée comme ne provenant que de l'effet Joule lié au passage du courant dans les milieux résistants de la cuve. Nous n'avons donc pas pris en considération la chute de potentiel électrique liée à l'électrolyse. Les valeurs de la conductivité thermique et celles de la résistivité électrique pour les différents matériaux de sous-domaines sont introduites dans le Tableau 4.1:

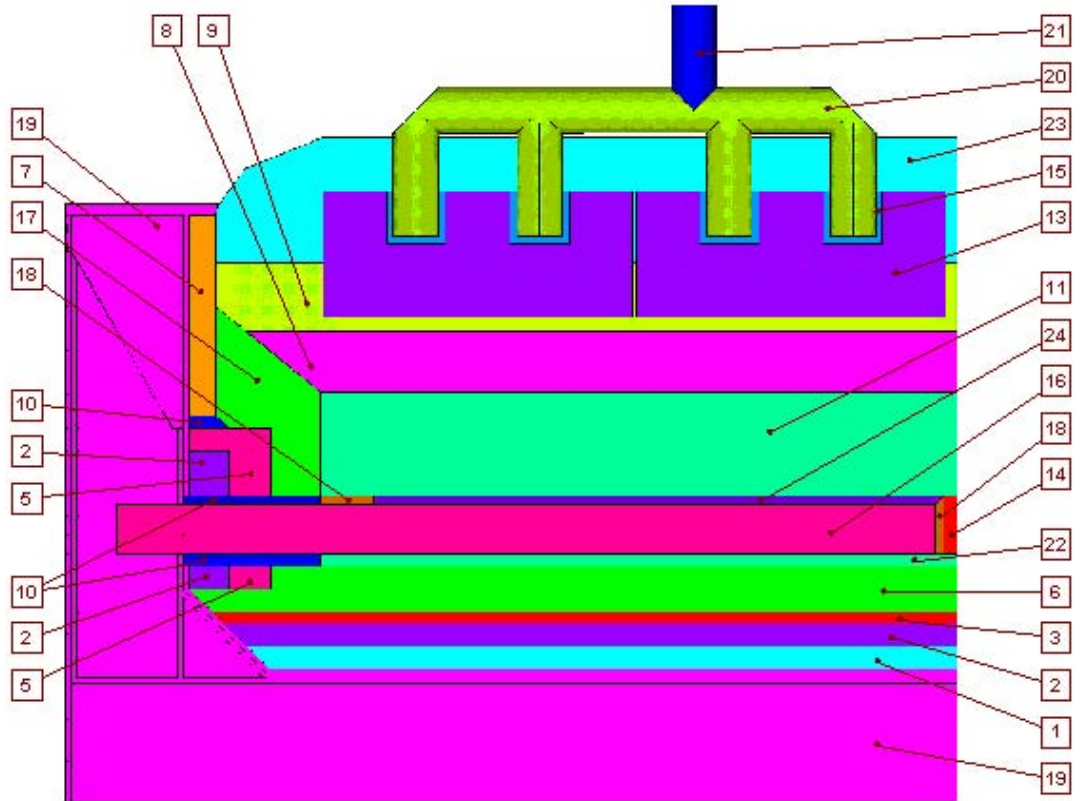


Figure 4.5: distribution des matériaux qui constituent la tranche

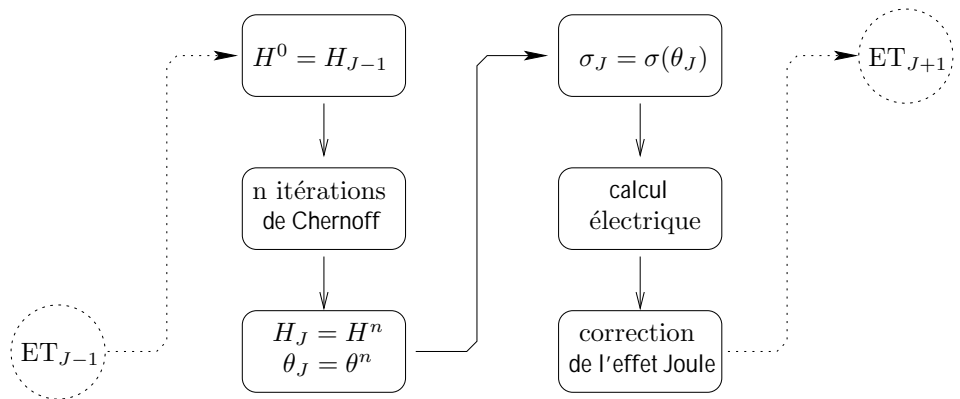
Mate. No	Material/ part of the model	electrical resistivity R [ohm.m]	thermal conductivity k [W/m.°C]
1	SKAMOLEX	insulator	0.07 - 200 °C 0.09 - 400 °C 0.10 - 600 °C
2	MOLAR INSULATING BRICKS	insulator	0.15 - 200 °C 0.19 - 600 °C
3	SEMI INSULATING BRICKS	insulator	0.30 - 200 °C 0.45 - 1000 °C
5	FIRE BRICKS	insulator	1.16 - 540 °C 1.26 - 1100 °C
6	FIRE BRICKS	insulator	1.16 - 540 °C 1.26 - 1100 °C
7	SIC	insulator	25.7 - 500 °C 21.4 - 600 °C
8	LIQUID ALUMINIUM	insulator for $\theta < 960^{\circ}\text{C}$ $0.6 \cdot 10^{-6}$ for $\theta > 960^{\circ}\text{C}$ Linear between θ_1, θ_2	1.2 for $\theta < 965^{\circ}\text{C}$ k_a for $\theta > 966^{\circ}\text{C}$ Linear between θ_1, θ_2
9	BATH	insulator for $\theta < 960^{\circ}\text{C}$ $0.4 \cdot 10^{-2}$ for $\theta > 960^{\circ}\text{C}$ Linear between θ_1, θ_2	1.2 for $\theta < 965^{\circ}\text{C}$ k_a for $\theta > 966^{\circ}\text{C}$ Linear between θ_1, θ_2
10	CASTABLE REFRACTORY	insulator	0.85 - 200 °C 0.90 - 1100 °C
11	CATHODE BLOCK	$13 \cdot 10^{-6}$ along the bar (X) $8 \cdot 10^{-6}$ in directions (Y,Z)	22 along the bar (X) 45 in directions (Y,Z)
12	CAST IRON (collector bars)	$0.2 \cdot 10^{-3}$	40
13	ANODE BLOCK	$0.5 \cdot 10^{-4}$	5
14	RAMMING PASTE	$0.585 \cdot 10^{-4}$	8
15	CASTE IRON (anode studs)	$0.200 \cdot 10^{-3}$	40
16	COLLECTOR BARS	$0.2 \cdot 10^{-6}$ - 100 °C $1.2 \cdot 10^{-6}$ - 1000 °C	50 - 100 °C 30 - 900 °C
17	RAMMING PASTE	insulator	8
18	KAOWOOL SEALS	insulator	0.1
19	STEEL SHELL	insulator	50
20	ANODES STUDS (steel)	$0.8 \cdot 10^{-6}$	40
21	ANODES RODS (aluminium)	$0.5 \cdot 10^{-7}$	190
22	ALUMINA BEDDING	insulator	0.25
23	ALUMINA COVER	insulator	0.5
15	CASTE IRON (collector bars)	insulator	40

Tableau 4.1: propriétés des matériaux qui constituent la tranche.

Dans la géométrie où nous faisons le calcul la distance interpolaire entre l'interface aluminium-bain et la face inférieure des blocs anodiques (ACD) est de l'ordre de 40 mm. Pour simuler une situation industrielle ayant $ACD = 60$ mm, la valeur de la résistivité électrique de la couche de bain a été multipliée par un facteur 1.5 dans la direction de "y". Cet ajustement est introduit à l'aide d'estimations industrielles.

Algorithme et résolution:

Nous traitons le calcul itératif électro-thermique en partant d'une condition initiale d'enthalpie constante, nous appliquons un calcul électrique suivi d'un cycle de calcul thermique comme indiqué dans Figure 4.6. Une correction de la valeur des conductivités thermiques est effectuée à la suite de chaque itération du schéma de Chernoff, tandis que la correction de la conductivité électrique en fonction de la température est effectuée seulement à la fin de ce cycle de calculs thermiques. Nous résolvons un problème pseudo-stationnaire qui converge vers la solution stationnaire. Dans chaque cycle de calcul thermique nous effectuons (n) itérations de Chernoff avec un pseudo-pas de temps τ relativement grand (10^6 seconde) de manière à ce que la convergence de l'algorithme global du couplage soit atteinte en un minimum temps CPU.



ET_J: le cycle (*J*) du calcul électro-thermique $\begin{cases} H_J & \text{enthalpie} \\ \theta_J & \text{température} \\ \sigma_J & \text{conductivité électrique} \end{cases}$

Figure 4.6: résolution itérative du problème de couplage électro-thermique

La convergence de ce calcul itératif pseudo-instationnaire est ainsi établie avec 7 cycles de calcul électro-thermique ($0 < J < 8$). Dans chaque cycle (ET_J) de calcul électro-thermique l'enthalpie H_J et la température θ_J sont obtenues en faisant un calcul thermique avec 15 itérations de Chernoff ($n=15$).

Rappelons que les matrices correspondant aux problèmes électriques et thermiques sont symétriques définies positives, ce qui permet l'utilisation des trois solveurs déjà indiqués dans le chapitre 3 i.e GC, GMRES et AMG.

Résultats obtenus et commentaires:

Dans cette partie nous introduisons les résultats thermo-électriques obtenus.

Nous commençons par l'introduction des résultats électriques présentés dans les Figures 4.7, 4.8 et 4.9:

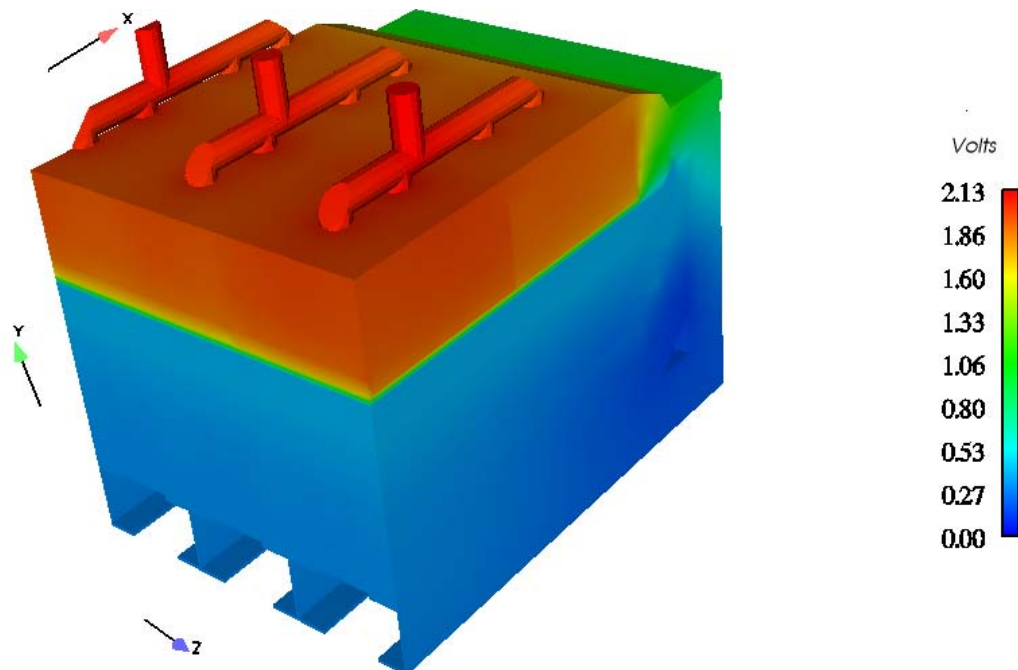


Figure 4.7: le potentiel électrique

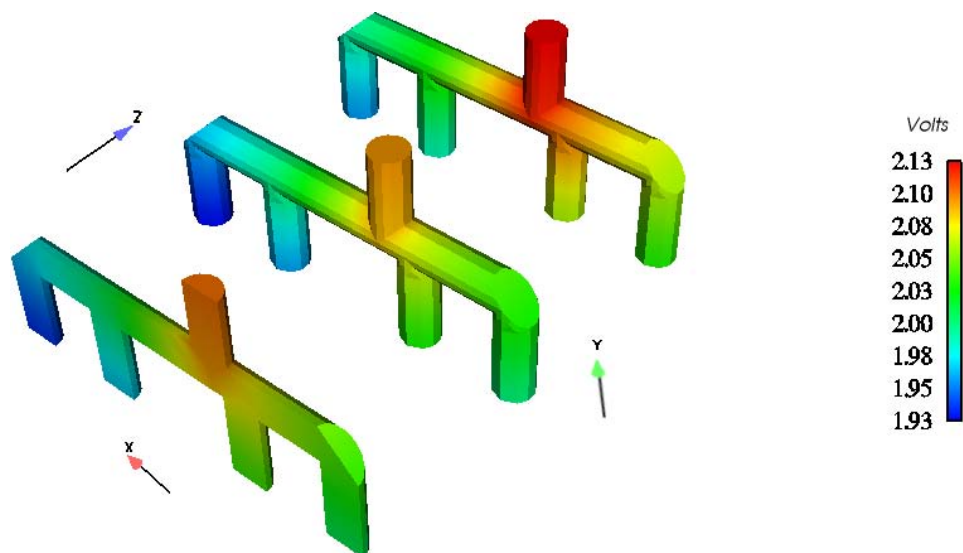


Figure 4.8: chute de potentiel électrique dans les griffes et les tiges anodiques

Dans la Figure 4.8 nous remarquons que la tension électrique dans les griffes anodiques diminue dans le sens de l'axe "Ox" ce qui indique que la chute de tension électrique la plus

forte est localisée dans la partie des griffes anodiques située près du bord de la cuve. Ceci est justifié par la faiblesse de la conductivité électrique dans la zone de la tranche située à côté du bord, juste au dessous de ces griffes. Une telle faiblesse de la conductivité électrique est due à une cause géométrique liée à l'existence de "ramming paste" (isolante) et à une cause thermique liée à la formation du talus solidifié, ce qui justifie aussi la distribution non uniforme de la tension électrique dans les blocs cathodiques (voir Figure 4.9). De plus, nous observons dans la Figure 4.9, ainsi que dans la Figure 4.8, que la distribution du potentiel électrique varie selon la direction "Oz", ce qui est justifié par la non symétrie du domaine de la tranche selon cette direction. Ceci montre que l'hypothèse faite sur le potentiel électrique à gradient nul selon la direction "Oz", ne correspond pas tout à fait à la situation physique du problème.

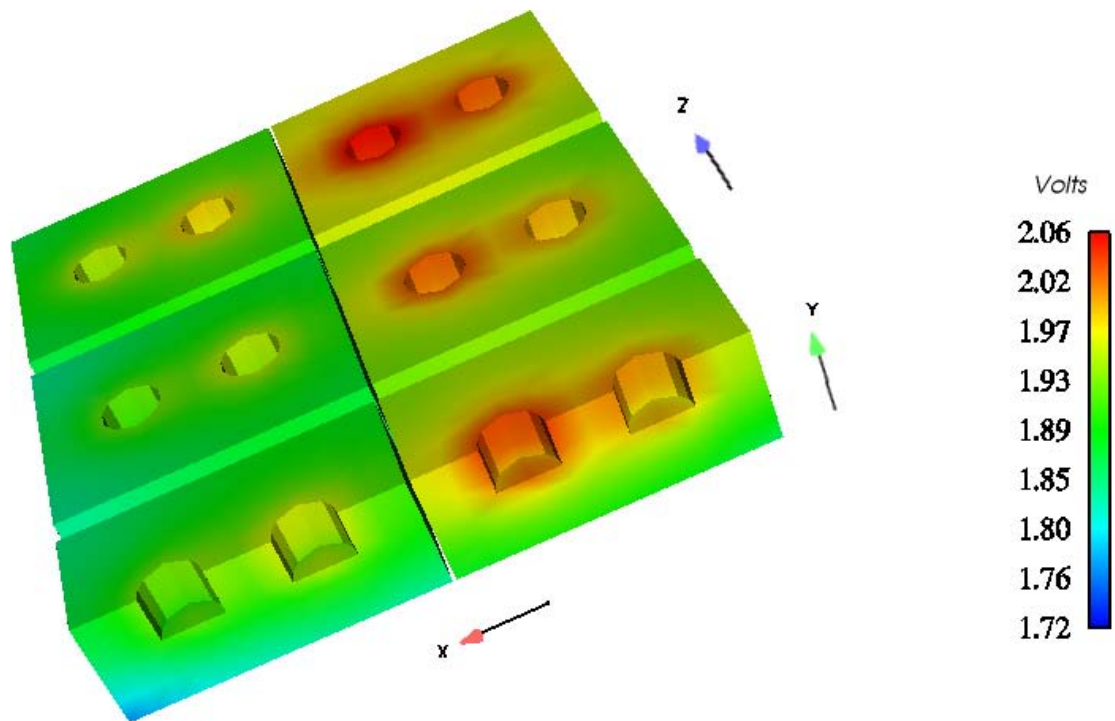


Figure 4.9: le potentiel électrique dans les blocs anodiques

En observant les Figures 4.7, 4.8 et 4.9, nous déduisons que la chute du potentiel électrique la plus forte est localisée dans la zone du bain. Ceci est cohérent avec le fait que cette zone possède la conductivité électrique la plus faible.

Dans les Figures 4.10 et 4.11 nous présentons des résultats du calcul thermique qui permettent de déterminer la géométrie de talus solidifié.

Nous pouvons voir, dans Figure 4.10, que le bain est situé dans la zone la plus chaude de la tranche ce qui provient du fait que l'électrolyte possède la résistivité électrique la plus grande.

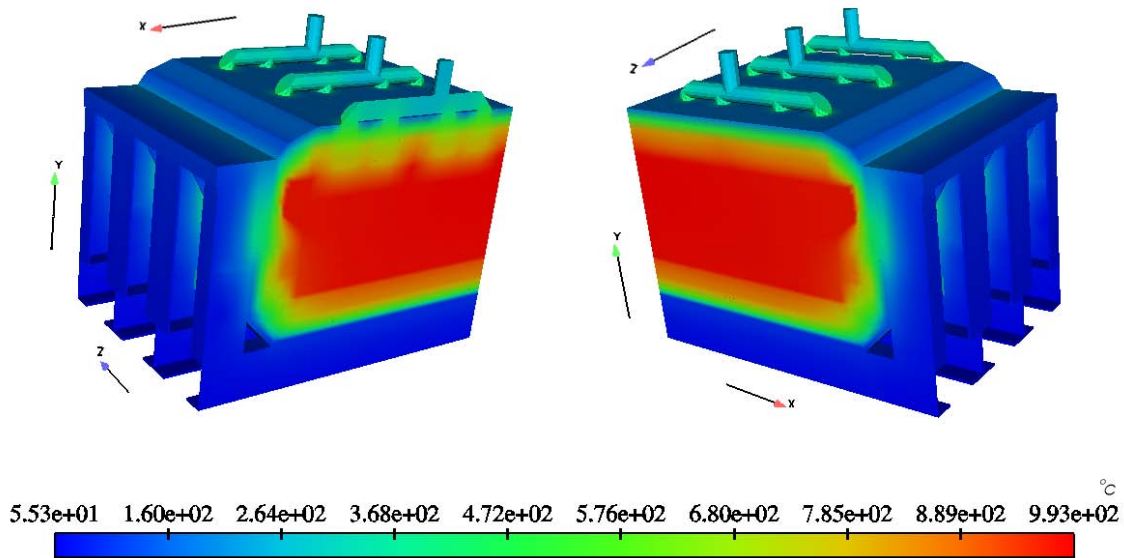


Figure 4.10: la température

Nous observons, dans la Figure 4.10, que le champ de température présente des valeurs comparables sur les deux parties opposées du bord situées dans le plan " $z = 0$ " et le plan " $z = 1.79$ m". Nous en concluons que le gradient thermique est relativement faible suivant la direction Oz , ce qui est conforme avec l'hypothèse d'adiabaticité imposée à la partie du bord située à " $z = 1.79$ m".

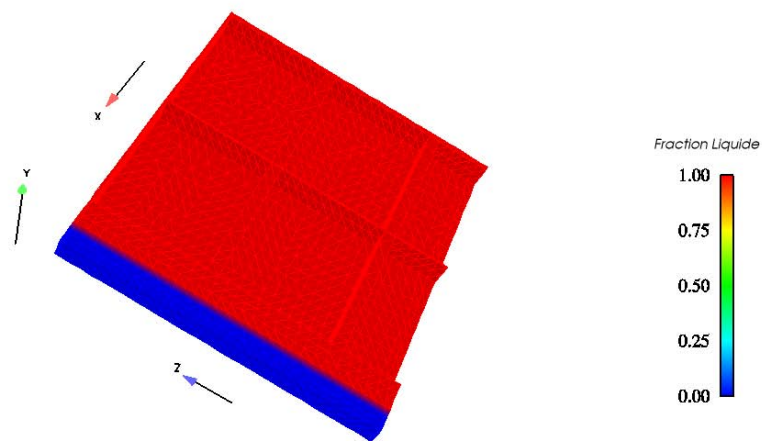


Figure 4.11: fraction liquide dans la zone du bain montre le profil du talus solidifié

Conductivité électrique dans les parties isolantes:

Nous rappelons que nous avons imposé une valeur “relativement faible” de la conductivité électrique (σ_{isol}) dans les parties isolantes de notre domaine. Pour étudier la sensibilité du calcul par rapport au choix de cette valeur de conductivité, nous effectuons plusieurs cas tests avec différentes valeurs de σ_{isol} en conservant toujours le même maillage.

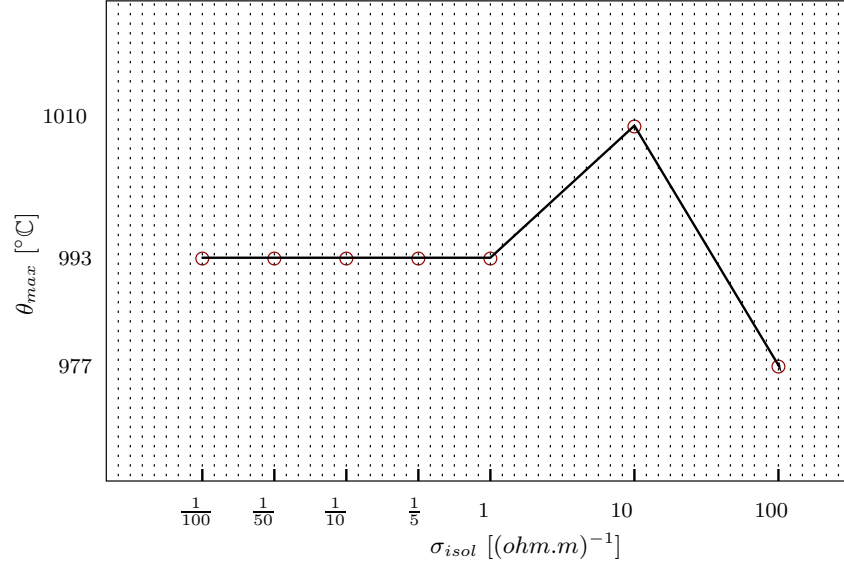


Figure 4.12: effet de σ_{isol} sur la valeur maximale de la température θ_{max}

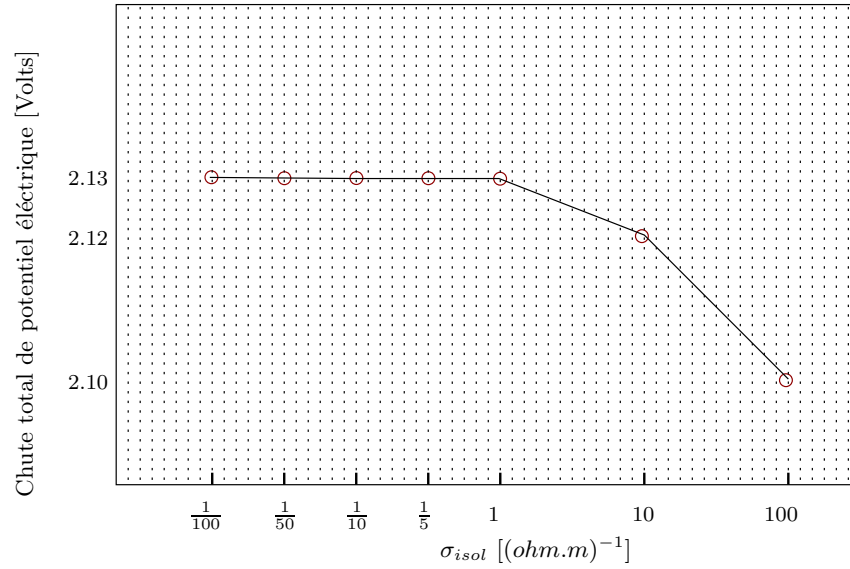


Figure 4.13: Effet de σ_{isol} sur la chute totale du potentiel électrique.

Les résultats thermo-électriques visualisés dans les Figures 4.12 et 4.13, montrent que le maximum de la température ainsi que la chute totale du potentiel électrique (différence entre le voltage à la tête de la tige anodique et celui à la sortie des barres collectrices) ne dépendent que très peu de la valeur imposée à σ_{isol} pour autant qu'elle soit inférieure à 1 (ohm.m)⁻¹.

Performance des solveurs des grands systèmes:

Nous rappelons que les calculs sont effectués avec un maillage contenant 11492 noeuds, ce qui exige la résolution de deux grands systèmes linéaires au cours du calcul itératif électro-thermique. Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre 4, nous pouvons utiliser différents solveurs pour résoudre ces systèmes ayant des matrices symétriques définies positives.

Solveurs	Temps CPU [minute]	Place mémoire [GB]
AMG	39	1.34
GMRES avec préconditionnement ILU(0)	71	0.86
GMRES avec préconditionnement DIAG	269	0.85
CG avec préconditionnement ILU(0)	81	0.64
CG avec préconditionnement DIAG	50	0.63

Tableau 4.2: comparaison des performances de différentes méthodes itératives.

Dans le Tableau 4.2 nous pouvons voir que l'usage de AMG est avantageux en temps CPU, tandis que la méthode GMRES préconditionnée par DIAG présente le maximum du temps de calcul. Ceci provient de la situation du problème qui est mal conditionné à cause des conditions limites imposées sur la température et le potentiel électrique où des conditions de Dirichlet sont imposées seulement sur la partie du bord située sur la barre collectrice. De plus, la géométrie complexe du domaine contenant des éléments de maillage étirés rend aussi la matrice du problème électrique ou thermique mal conditionnée. Par contre la méthode AMG exige une place mémoire maximale (1.34 GB), ce qui provient du fait que l'algorithme de cette méthode nécessite un stockage simultané de différentes matrices correspondant à différents niveaux d'agrégation.

Comparaison avec les résultats ANSYS

Nous commençons par une comparaison faite entre les résultats obtenus sur le potentiel électriques par notre calcul et ceux obtenus par la routine ANSYS. Nous présentons dans le Tableau 4.3 les différentes valeurs de chute de potentiel électrique relatif à différentes parties de la tranche. Les parties concernées par cette comparaison sont les griffes anodiques, les anodes, le bain et l'aluminium, les blocs et les barres cathodiques.

parties du modèle	ANSYS chute de potentiel électrique [Volts]	ALUCCELL chute de potentiel électrique [Volts]
tiges et griffes anodiques	0.211	0.207
anodes	0.215	0.208
aluminium et bain	1.344	1.332
blocs et barres cathodiques	0.364	0.391

Tableau 4.3: comparaison de chute de potentiel électrique .

Nous voyons que la somme des valeurs de la chute de potentiel, dans ces deux calculs, correspond à la valeur de la chute de potentiel totale dans la tranche représentée dans la Figure 4.7.

Comme il ressort de la Figure 4.5, les griffes anodiques sont partiellement insérées dans les blocs anodiques qui sont eux mêmes partiellement immergés dans le bain. La chute de potentiel au niveau des anodes est alors estimée comme la différence entre les valeurs minimales du potentiel au niveau des griffes et des anodes respectivement. De même la chute de potentiel au niveau du bain et de l'aluminium est estimée comme étant la différence entre les valeurs minimales du potentiel au niveau des anodes et de la couche d'aluminium respectivement.

Nous tenons compte du fait que la tranche contient 2.5 anodes tandis qu'il y a 22 anodes dans la cuve correspondante; ceci permet de dire que la puissance dissipée par effet Joule dans toute la cuve peut être estimée de l'ordre $\frac{22}{2.5}$ fois celle calculée dans la tranche. Par conséquent cette puissance est égale à $\frac{22}{2.5} \times 42.83 = 370$ KWatts, ce qui est comparable à l'estimation fournie par le calcul avec ANSYS (372 KWatts).

Afin de montrer la correspondance des résultats thermiques entre les deux calculs ALUCCELL et ANSYS, nous choisissons de comparer les valeurs de la température en des points situés dans le domaine de calcul. Le Tableau 4.4 donne les coordonnées de ces points, le numéro de référence des sous domaines auxquels ils appartiennent et la température en chaque point; ceci pour les deux logiciels ALUCCELL et ANSYS.

N°	Sous-domaine	X [cm]	Y [cm]	Z [cm]	ALUCCELL température, $\theta_{Alucell}$ [°C]	ANSYS température, θ_{Ansys} [°C]	$\frac{ \theta_{Ansys}-\theta_{Alucell} }{\max \theta_{Alucell}}$ [%]
1	7	210.95	78.12	1.90	406.91	414.05	0.7
2	8	0.00	90.13	75.33	992.65	989.15	0.34
3	8	46.29	90.13	129.48	991.72	988.22	0.35
4	8	77.10	92.96	0.00	989.44	985.81	0.37
5	8	100.48	84.46	171.36	987.20	983.57	0.36
6	8	131.27	87.30	129.12	983.23	979.41	0.38
7	8	162.52	78.80	128.05	978.01	973.88	0.42
8	8	185.67	89.38	140.53	974.17	969.60	0.46
9	9	0.00	99.80	0.00	992.55	989.00	0.36
10	9	14.30	97.80	148.20	992.98	989.52	0.35
11	9	23.19	99.80	112.20	992.45	988.95	0.35
12	9	61.96	99.80	33.00	990.45	986.84	0.36
13	9	108.57	96.80	93.60	986.32	982.63	0.37
14	9	162.31	96.80	39.60	978.12	973.92	0.42
15	9	192.18	110.55	140.82	973.41	968.30	0.52
16	17	181.48	81.63	8.45	974.99	970.77	0.43
17	17	191.90	90.13	44.800	972.96	968.42	0.46

Tableau 4.4: comparaison des valeurs de la température obtenues par ALUCCELL et ANSYS.

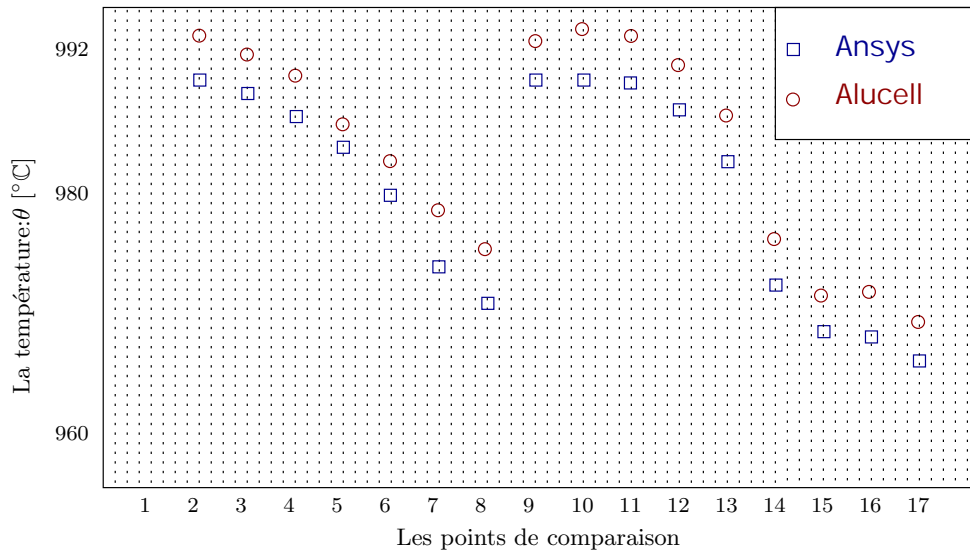


Figure 4.14: Les valeurs de la température calculées par ANSYS et ALUCELL.

Pour estimer la différence qui existe entre les résultats des deux logiciels montrés dans le

Tableau 4.3, nous divisons leur différence en chaque point, par la valeur maximale de la température dans la tranche. Nous remarquons ainsi que l'écart maximal de 1.4 % entre les résultats de ces deux calculs a lieu dans le matériaux (7) i.e. Silicium. Cet écart est de l'ordre des approximations numériques engendrées par la discrétisation.

Le temps de calcul déjà introduit dans le Tableau 4.2, est de l'ordre de 39 minutes pour le solveur AMG, ce qui reste comparable au temps de calcul ANSYS (26 minutes) si nous tenons compte du fait que ce dernier a un nombre d'éléments de maillage hexaédriques cinq fois plus petit que le nombre d'éléments tétraédriques intervenant dans notre calcul. Ainsi un temps supplémentaire doit être consacré par ALUCCELL pour l'assemblage des matrices élémentaires.

4.1.2 Modèle d'une cuve prise dans son intégralité

Dans cette partie de travail nous présentons un calcul numérique du problème thermique couplé avec le problème électrique effectué dans une cuve d'électrolyse entière. L'importance de ce calcul provient du fait qu'il représente une étape dans la simulation numérique au niveau industriel puisque les calculs faits par d'autres centres de recherche dans un cadre similaire étaient, à notre connaissance, toujours effectués dans des parties limitées de la cuve. Ce calcul est donc le premier qui tienne compte de la cuve dans son intégralité.

Géométrie et maillage:

En plus des matériaux situés à l'intérieur de la cellule d'électrolyse, le domaine de calcul comprend aussi certains conducteurs extérieurs à celle-ci. (voir Figure 4.15)

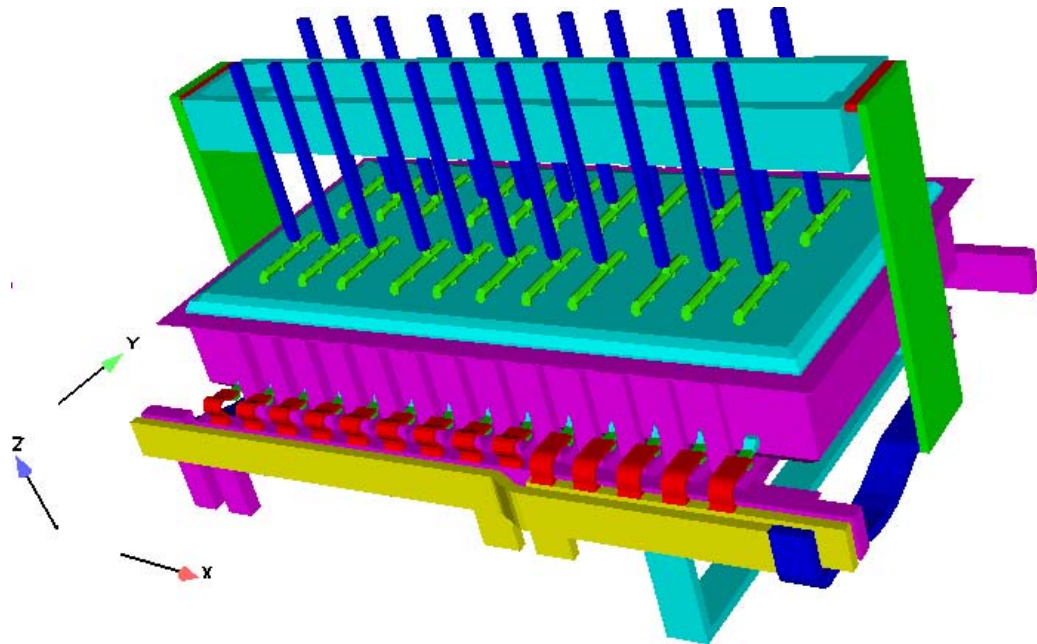


Figure 4.15: une cuve complète

Le domaine, dans lequel le calcul est effectué, est formé de 32 sous domaines y compris ceux introduits dans la section précédente. Comme l'indique la Figure 4.15, ce domaine comprend 22 blocs anodiques et 28 blocs cathodiques disposés successivement selon la direction de l'axe "Ox". En comparaison avec le modèle de la tranche nous voyons que ce domaine contient des sous domaines supplémentaires représentés dans la Figure 4.18 et dans le Tableau 4.5 donnés plus loin.

Comme dans le cas de la tranche nous effectuons un maillage tétraédrique du domaine en le raffinant dans la partie correspondant à la zone du bain. Nous obtenons alors un maillage comprenant 924463 éléments et 177465 noeuds, y compris les 91210 noeuds situés dans le sous domaine contenant l'aluminium et le bain (voir parties 8 et 9 de la Figure 4.5).

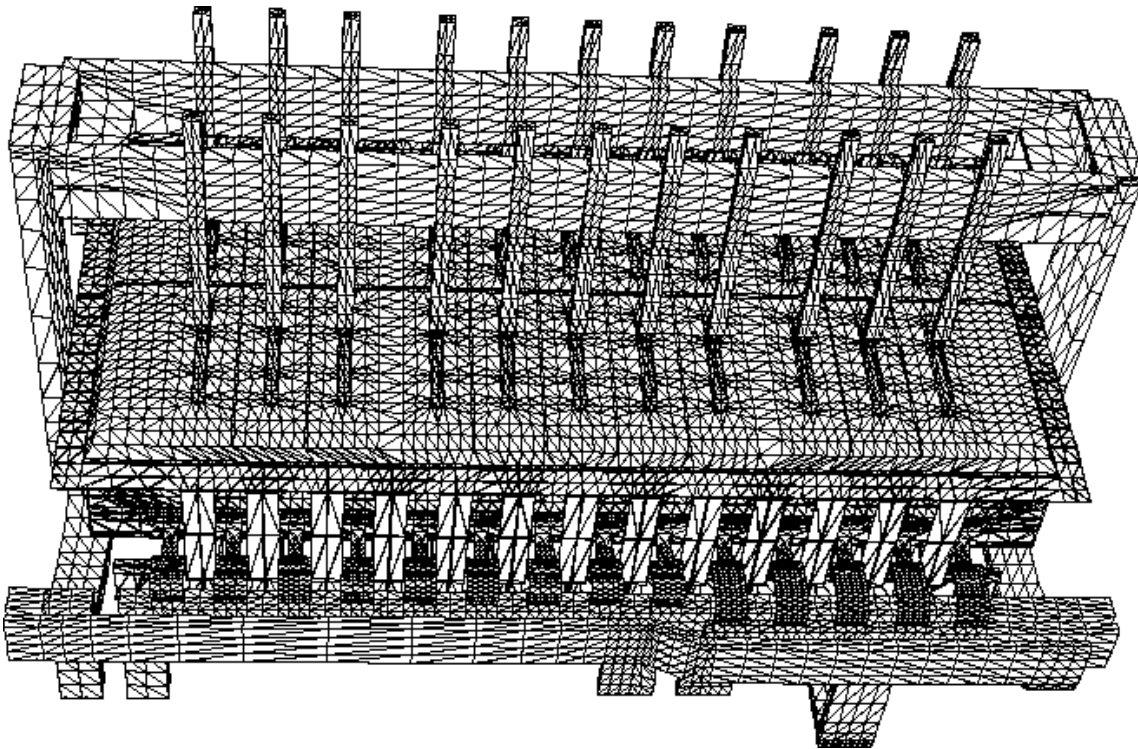


Figure 4.16: Maillage tétraédrique d'une cuve complète

Hypothèses de simulation:

Nous faisons l'hypothèse que le fluide est au repos et que le contact thermo-électrique est parfait aux interfaces entre les matériaux.

Le problème électrique est résolu en imposant une densité de courant sur les parties du bord situées aux entrées des barres omnibus: E_1 , E_2 et E_3 voir (Figure 4.17) et en imposant une valeur nulle du potentiel électrique sur les parties du bord S_1 , S_2 et S_3 situées à la sortie de ces mêmes barres. Une condition d'isolation électrique est imposée sur les autres

parties du bord.

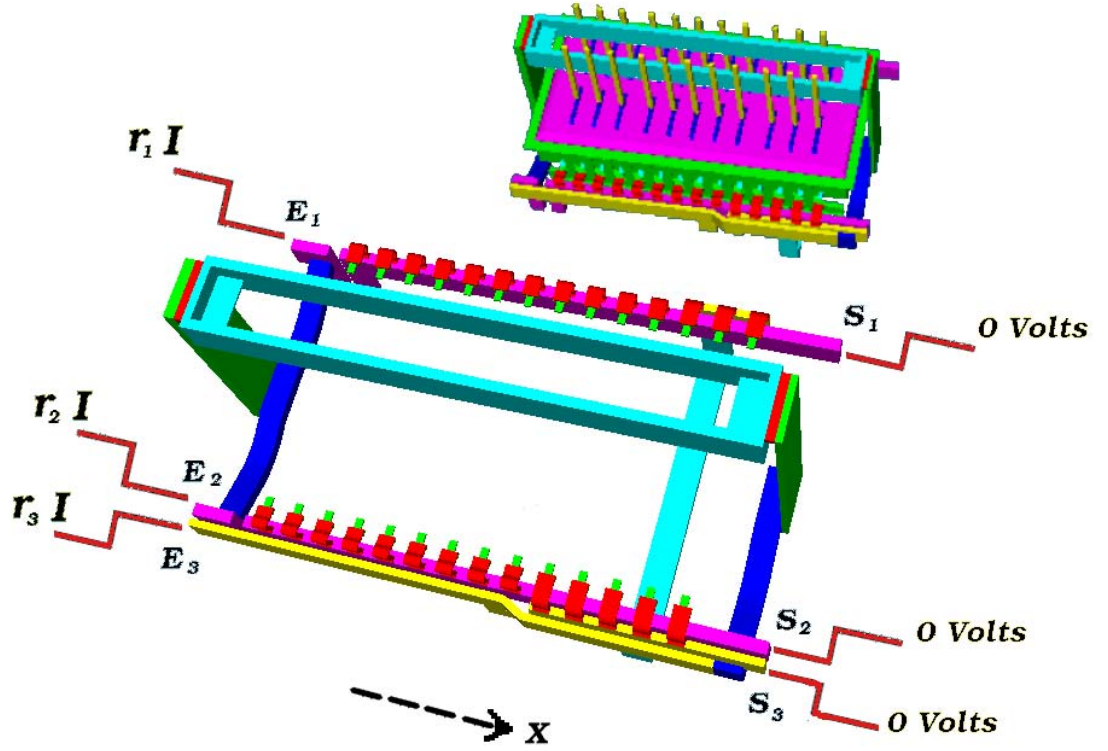


Figure 4.17: entrée et sortie du courant traversant la cuve

Le courant total I est divisé en trois courants ayant les valeurs r_1I , r_2I et r_3I imposées sur E_1 , E_2 et E_3 avec $r_1 + r_2 + r_3 = 1$. La valeur de la densité du courant est estimée en divisant le courant correspondant à chaque partie “entrée” par la surface de celle-ci.

Le problème thermique est résolu en imposant une condition de Dirichlet $\theta = 50^\circ\text{C}$ sur les parties “entrées” et “sorties” déjà indiquées.

D’une façon analogue au calcul de la tranche, nous imposons sur le bord du domaine une condition de convection thermique pour laquelle le coefficient de transfert est donné par (4.1). Rappelons que le transport de chaleur par convection est simulé par une augmentation de la conductivité thermique. Dans ce cas nous faisons usage d’une conductivité artificielle ayant la même valeur que celle utilisée dans le calcul de la tranche. Il reste maintenant à préciser les caractéristiques thermo-électriques des matériaux constituant le domaine du calcul. Nous conservons à cet effet les valeurs introduites dans les calculs de la tranche en y ajoutant les valeurs concernant les parties supplémentaires présentées dans la Figure 4.18 et le Tableau 4.5.

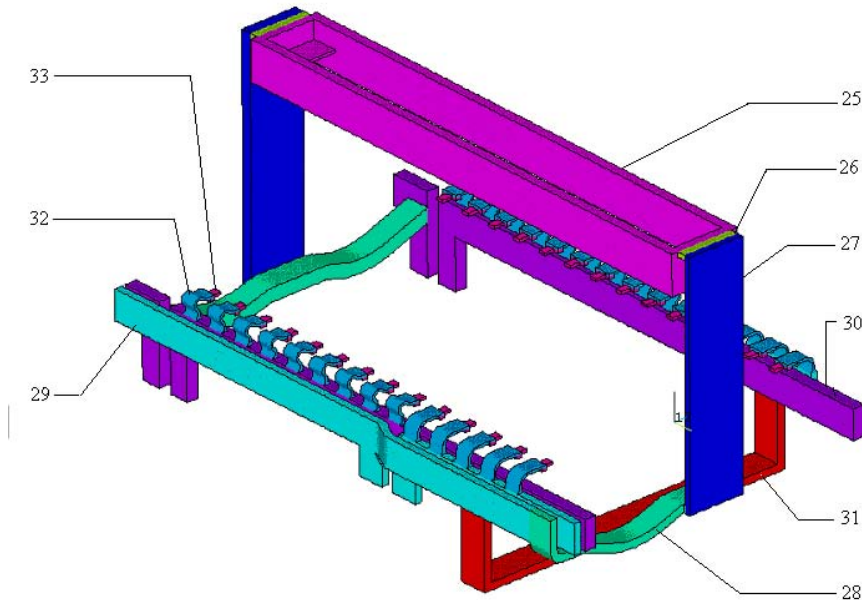


Figure 4.18: Les matériaux de connexion externe

Mate. No	Material/ part of the model	electrical resistivity R [ohm.m]	thermal conductivity k [W/m.°C]
25	BEAM	$0.50 \cdot 10^{-6}$	190
26	ANODES RISER	$0.29 \cdot 10^{-7}$	190
27	ANODES RISER	$0.29 \cdot 10^{-7}$	190
28	RISER (flexes)	$0.29 \cdot 10^{-7}$	190
29	BUSBARS	$0.29 \cdot 10^{-7}$	190
30	BUSBARS	$0.29 \cdot 10^{-7}$	190
31	BUSBARS	$0.29 \cdot 10^{-7}$	190
32	FLEXES	$0.29 \cdot 10^{-7}$	190
33	CONNEXION BARRE CATH-FLEXES	$0.80 \cdot 10^{-6}$	190

Tableau 4.5: propriétés des matériaux de connexion électrique.

Résultats obtenus et commentaires:

Nous utilisons le même schéma de couplage que dans la Figure 4.6. Après 5.5 heures de calcul (PC Pentium(R) 4, CPU 2.80 GHz, 2 GB RAM), en résolvant les systèmes par la méthode itérative algébrique AMG, nous obtenons les résultats du calcul thermo-électriques.

Le potentiel électrique obtenu est donné dans la Figure 4.19. Nous observons que la valeur du potentiel est maximale dans les parties E_1 , E_2 et E_3 . La chute de potentiel est relativement faible dans la poutre et les tiges anodiques, ce qui correspond à la conductivité électrique qui est élevée dans ces matériaux. Les valeurs minimales du potentiel électrique

commencent à apparaître dans les matériaux (31) et (32) de la Figure 5.18 qui correspondent à la sortie de la cuve.

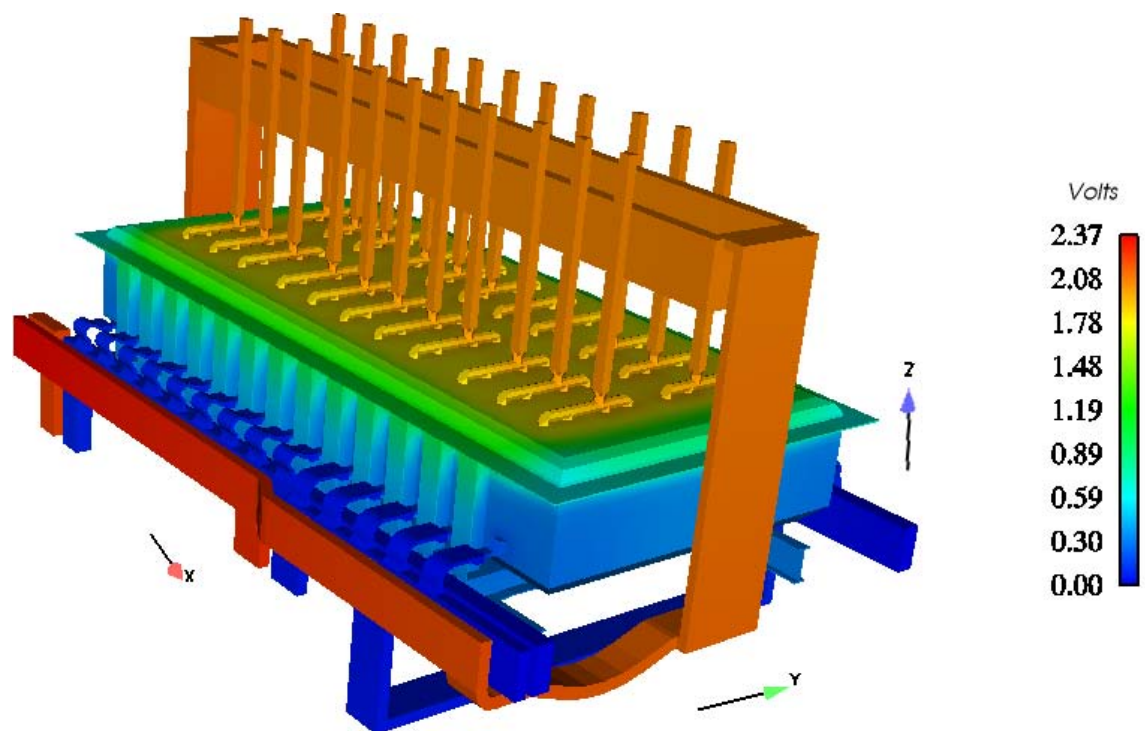


Figure 4.19: le potentiel électrique

Il est clair, que la chute de potentiel maximale a lieu dans la partie du domaine qui contient les matériaux les plus résistants: blocs anodiques et bain liquide ce qui est en accord à ce qui est présenté dans la Figure 4.20.

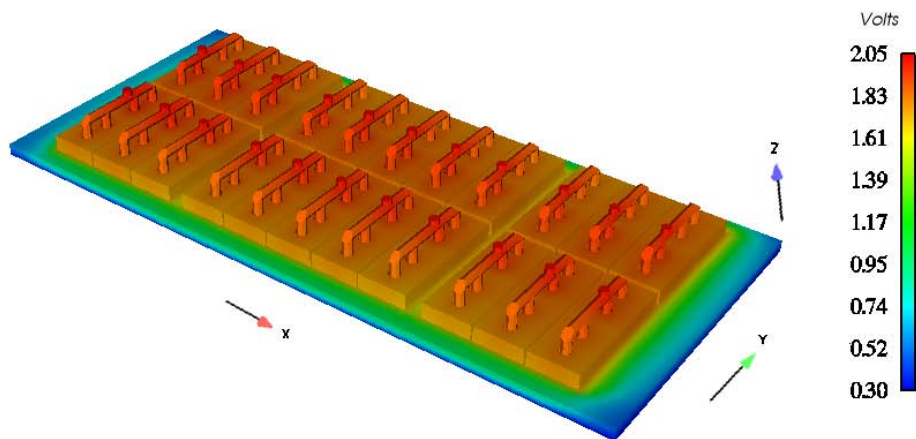


Figure 4.20: représentation de la zone dans laquelle la chute de potentiel est la plus grande

Nous présentons dans la Figure 4.21 une visualisation du potentiel électrique dans un sous-domaine de la cuve. L'emplacement de ce sous-domaine est celui de la tranche (présentée dans la section précédente). Les résultats observés présentent une variation du voltage électrique selon la direction "Ox", ce qui ne correspond pas à l'hypothèse du gradient de potentiel électrique négligeable selon cette direction dans le calcul de la tranche.

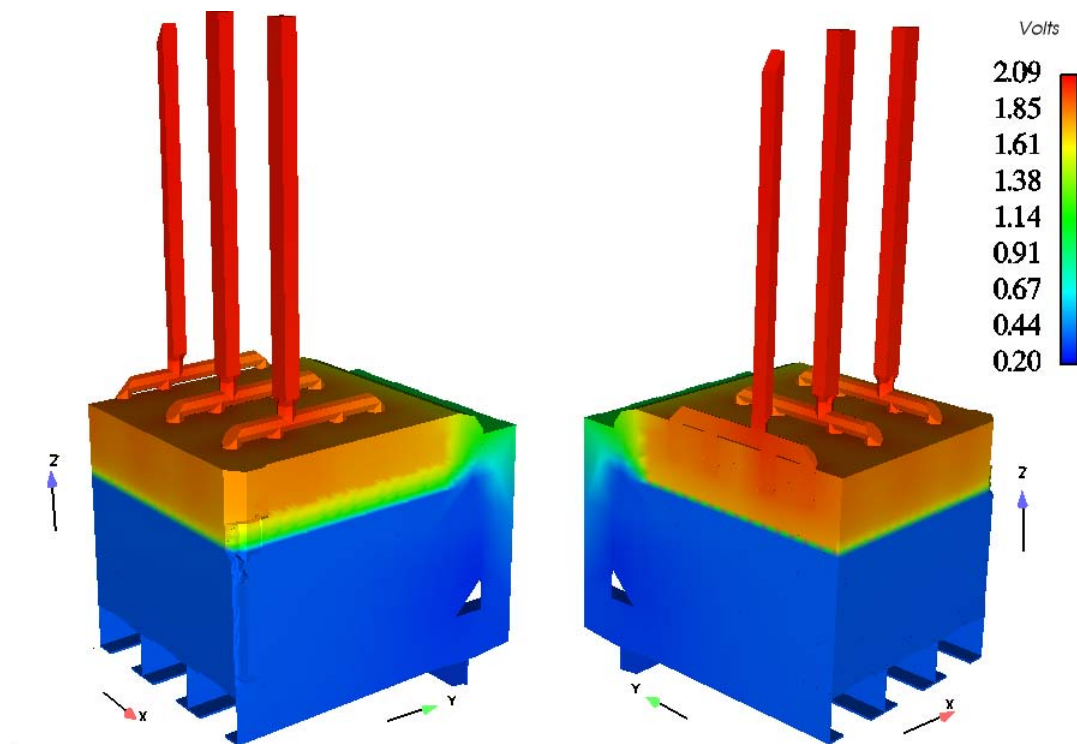


Figure 4.21: le potentiel électrique restreint à la zone de la tranche

Les résultats thermiques donnent un champ de température au niveau de la cuve ayant la valeur maximale 979°C comme il ressort de la Figure 4.22.

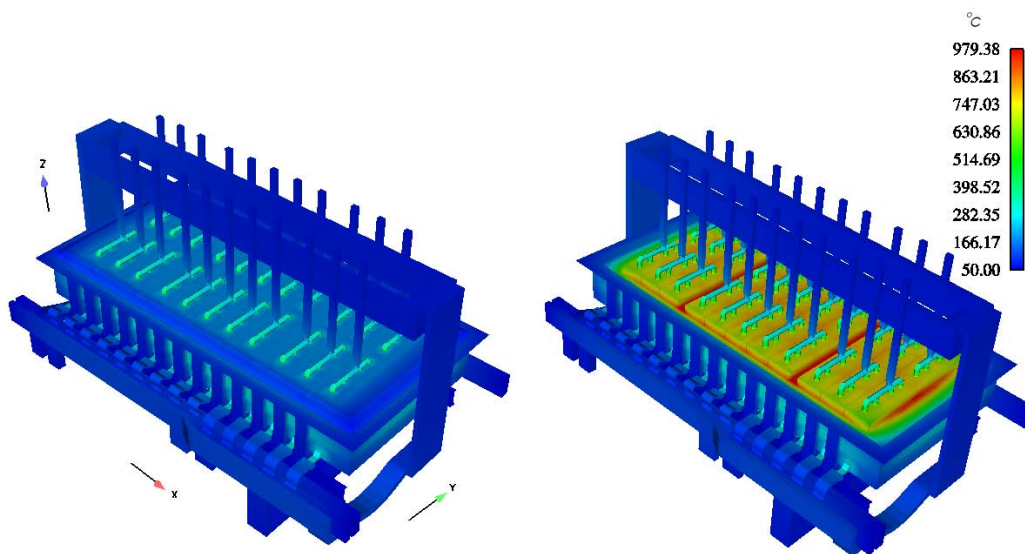


Figure 4.22: la température visualisée dans la cuve avec et sans couverture (Mat. $N^{\circ} 23$)

Nous présentons dans la Figure 4.23 une visualisation du champ de température dans le sous-domaine de la cuve qui correspond à la tranche. Les résultats observés présentent une variation négligeable de la température selon la direction “Ox”, ce qui justifie l’hypothèse de gradient thermique négligeable selon cette direction dans le calcul de la tranche.

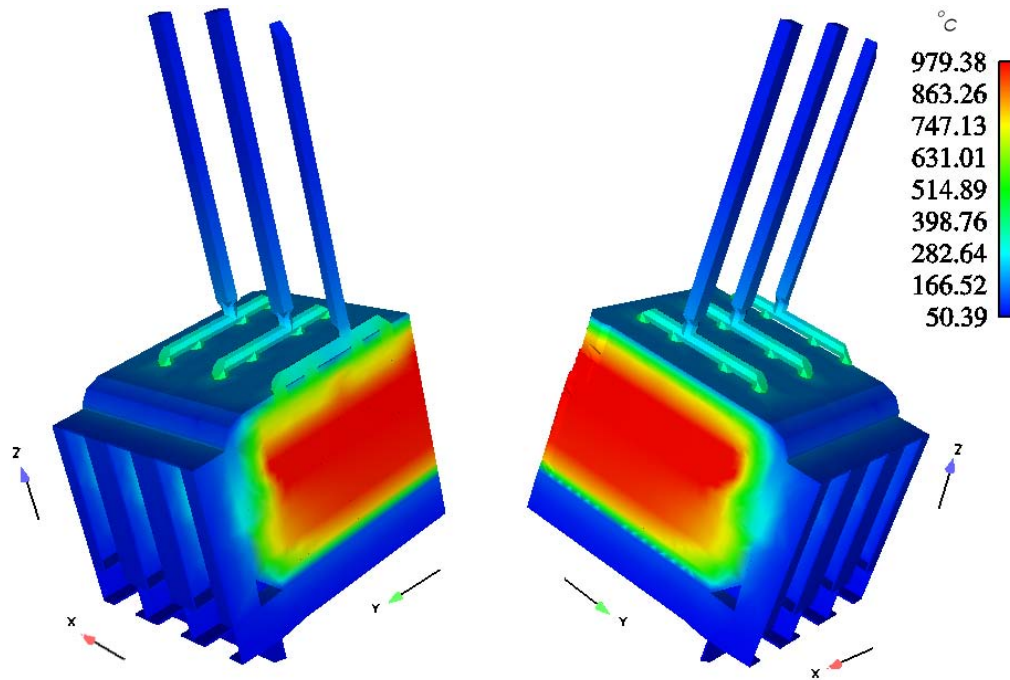


Figure 4.23: le champ de la température restreint à la zone de la tranche

Dans la Figure 4.24 nous observons le profil elliptique du talus solidifié, ce qui est justifié par l’absence d’effets convectifs.

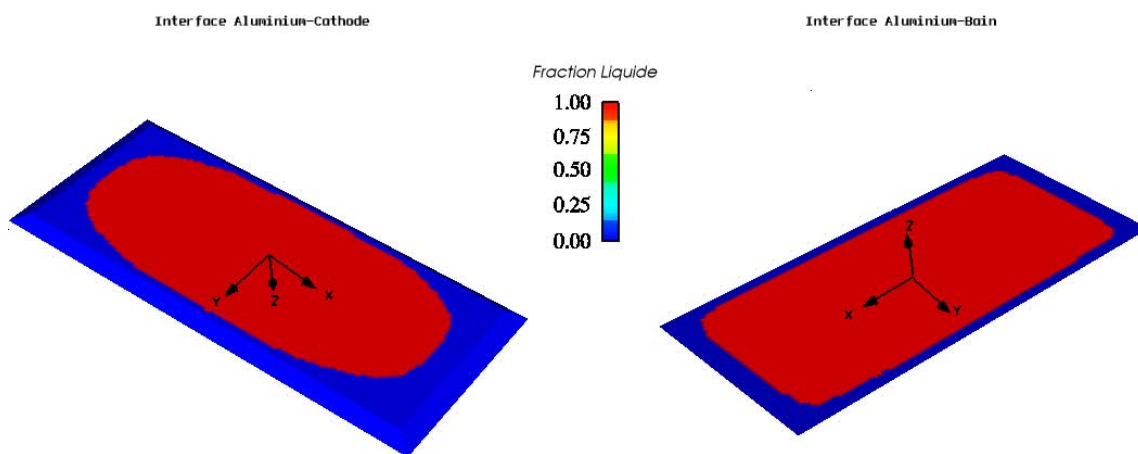


Figure 4.24: fraction liquide dans la couche du métal montrant le profil du talus solidifié

La stabilité de la cuve est liée au champ des forces électromagnétiques générées par les courants électriques. Il est alors instructif d'observer l'effet de la solidification thermique sur la forme et l'intensité des lignes de courant électrique. Dans ce but nous calculons en norme L^1 dans chacun des matériaux la différence Δj entre:

- l'intensité du courant électrique provenant d'un calcul électrique de la cuve sans talus,
- l'intensité du courant électrique provenant du calcul électro-thermique.

Cette différence est mesurée relativement au courant total I (voir Tableau 4.6).

N°	Matériaux	$\ \Delta j\ _{L^1}$ KA	Estimation relative au courant total [%]
8	LIQUID ALUMINIUM	34.883	19.71
9	BATH	1.750	0.99
11	CATHODE BLOCK	23.822	13.46
13	ANODE BLOCK	3.360	1.90
14	RAMMING PASTE	0.469	0.26
15	CASTE IRON (anode studs)	0.102	0.06
16	COLLECTOR BARS	12.684	7.17
17	RAMMING PASTE	1.789	1.01
20	ANODES STUDS (steel)	3.543	2.00
22	ANODES RODS (aluminium)	4.671	2.64
25	BEAM	6.376	3.60
26	ANODES RISER	0.071	0.04
27	ANODES RISER	0.189	0.11
28	RISER (flexes)	0.000	0.00
29	BUSBARS	3.602	2.03
30	BUSBARS	9.737	5.50
31	BUSBARS	6.377	3.60
32	FLEXES	4.967	2.81
33	CONNEXION BARRE CATH-FLEXES	1.496	0.84

Tableau 4.6: effet de solidification sur le courant électrique.

Il est clair d'après ce tableau que l'effet du champ thermique sur les lignes de courant est le plus grand dans la couche du métal, ce qui provient de fait que le talus solidifié a sa partie la plus épaisse dans cette zone. De ce fait, une déviation relativement forte du courant électrique a lieu non seulement dans l'aluminium mais aussi dans les blocs cathodiques qui sont en contact avec le talus solidifié.

Dans le Tableau 4.7 nous présentons la dissipation par effet Joule dans chacun des matériaux électriquement conducteurs:

N°	Matériaux	Dissipation par effet Joule [KWatts]
8	LIQUID ALUMINIUM	0.31
9	BATH	232.71
11	CATHODE BLOCK	7.70
13	ANODE BLOCK	21.13
14	RAMMING PASTE	0.12
15	CASTE IRON (anode studs)	3.97
16	COLLECTOR BARS	15.72
17	RAMMING PASTE	0.60
20	ANODES STUDS (steel)	24.09
22	ANODES RODS (aluminium)	5.69
25	BEAM	5.33
26	ANODES RISER	0.59
27	ANODES RISER	11.37
28	RISER (flexes)	8.44
29	BUSBARS	11.62
30	BUSBARS	10.61
31	BUSBARS	0.96
32	FLEXES	1.87
33	CONNEXION BARRE	26.35

Tableau 4.7: dissipation par effet Joule obtenue par le calcul électro-thermique.

La puissance thermique totale (Input Heat) est la somme de toutes les valeurs mentionnées dans ce tableau. Elle est de l'ordre de 389.18 KWatts.

Afin de vérifier la conservation énergétique de notre calcul électro-thermique, nous présentons dans le Tableau 4.8 un calcul de la dissipation thermique convective (Output Heat) au bord du domaine. Le calcul est établi pour chaque matériau appartenant au bord considéré.

N°	Matériaux	Chaleur dissipée par convection [KWatts]
16	COLLECTOR BARS	13.56
19	STEEL SHELL	155.54
20	ANODES STUDS (steel)	75.07
22	ANODES RODS (aluminium)	15.74
23	ALUMINA COVER	72.87
25	BEAM	8.57
26	ANODES RISER	0.24
27	ANODES RISER	10.43
28	RISER (flexes)	6.50
29	BUSBARS	10.17
30	BUSBARS	10.09
31	BUSBARS	1.37
32	FLEXES	9.69
33	CONNEXION BARRE	11.95

Tableau 4.8: dissipation thermique par convection au bord de la cuve (output Heat) obtenu par le calcul électro-thermique

La valeur totale de l'énergie dissipée par convection est de l'ordre de 401.79 KWatts ce qui correspond à un erreur numérique de l'ordre de 3.14 %. Ces résultats sont parfaitement comparables avec l'erreur estimée dans des calculs électro-thermiques effectués par Marc Dupuis dans des parties limitées de la cuve (voir [MDUP97] pages 9 et 12).

4.2 Simulations du problème thermique couplé avec la MHD

Dans la section précédente nous avons traité le problème thermique sans convection. L'effet convectif dû à la MHD est pris en compte artificiellement en faisant usage d'une conductivité thermique additionnelle.

Dans le calcul électro-thermique de la section précédente le champ électrique ne dépend que de la température et réciproquement. En tenant compte de la MHD, le champ électrique est aussi influencé par la vitesse dans le bain. De plus il y a "des effets d'interaction" entre le champ électrique et l'induction magnétique.

En effectuant le couplage MHD-Thermique il est nécessaire de tenir compte du fait que le champ de vitesse est soumis simultanément à l'effet du champ thermique, du courant électrique et de l'induction magnétique.

Ainsi l'établissement d'un couplage MHD-Thermique complet est relativement compliqué. L'importance du calcul tenant compte du couplage introduit dans cette section est grande car celui-ci n'a jamais été effectué auparavant.

La géométrie du domaine et le maillage utilisé sont les mêmes que ceux introduits dans la section précédente. Les conditions de bord pour les variables électro-thermiques sont identiques à celles déjà présentées précédemment. Nous conservons les caractéristiques déjà introduites pour les différents matériaux. Seule la conductivité thermique, utilisée dans ce calcul, est celle correspondant à sa valeur réelle. Nous ne faisons donc pas usage d'une conductivité artificielle.

4.2.1 Hypothèses du couplage MHD-Thermique

Afin d'aborder par étapes ce problème complexe, nous faisons les hypothèses suivantes:

- L'interface entre les deux fluides est supposée horizontale.
- L'induction magnétique est fixée à partir d'un calcul MHD déjà effectué. Un pas itératif de l'algorithme est alors décrit dans la Figure 4.25:

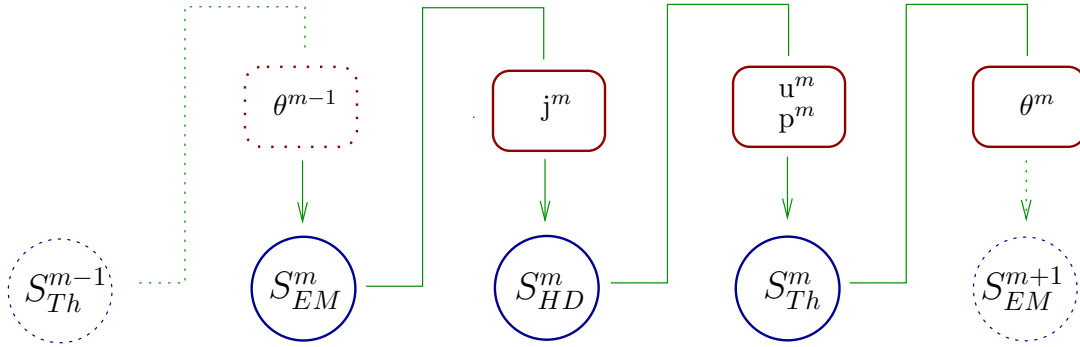


Figure 4.25: algorithme de résolution itérative du problème de couplage MHD-Thermique.

S_{EM}^m , S_{HD}^m , S_{Th}^m : itérations du calcul électromagnétique, hydrodynamique et thermique.

Dans chaque cycle de cet algorithme nous traitons successivement les calculs EM, HD et Th, jusqu'à l'obtention de la convergence vers une solution stationnaire. La valeur initiale de l'enthalpie introduite dans le schéma de Chernoff utilisé dans ce calcul MHD-Thermique est celle déjà obtenue dans le calcul électro-thermique avec des fluides au repos. Pour diminuer le temps du calcul, il est possible d'effectuer après chaque calcul EM, plusieurs cycles du calcul HD-Th.

Pour résoudre les systèmes linéaires, nous utilisons AMG pour la résolution de EM, GMRES avec un préconditionnement ILU(0) pour la résolution de problèmes HD et Th.

Résultats obtenus et commentaires:

Après 10 heures de calcul (PC Pentium(R) 4, CPU 2.80 GHz, 2 GB RAM), nous obtenons la convergence de l'algorithme du couplage MHD-Thermique. Nous représentons dans la Figure 4.26 les résultats relatifs au champ électrique.

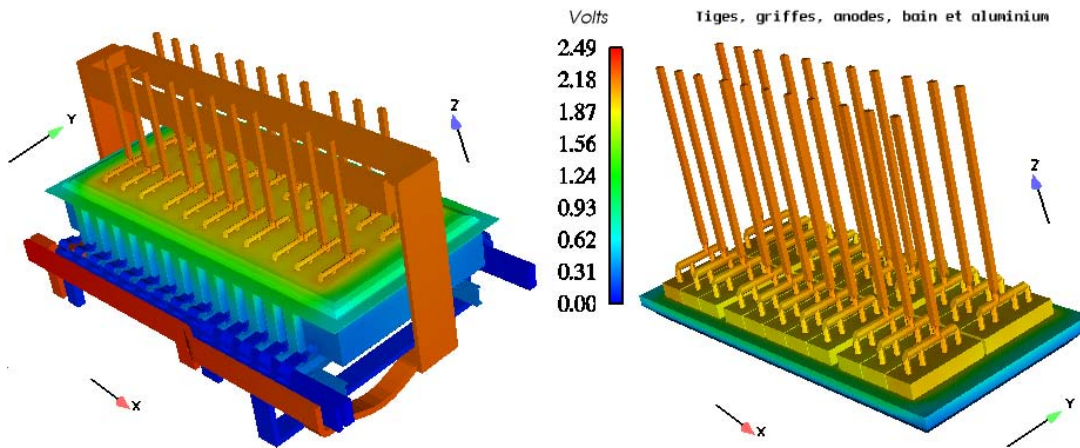


Figure 4.26: Le potentiel électrique dans un couplage MHD-Thermique

La chute du potentiel électrique observée est comparable à celle obtenue dans le calcul fait avec les fluides au repos.

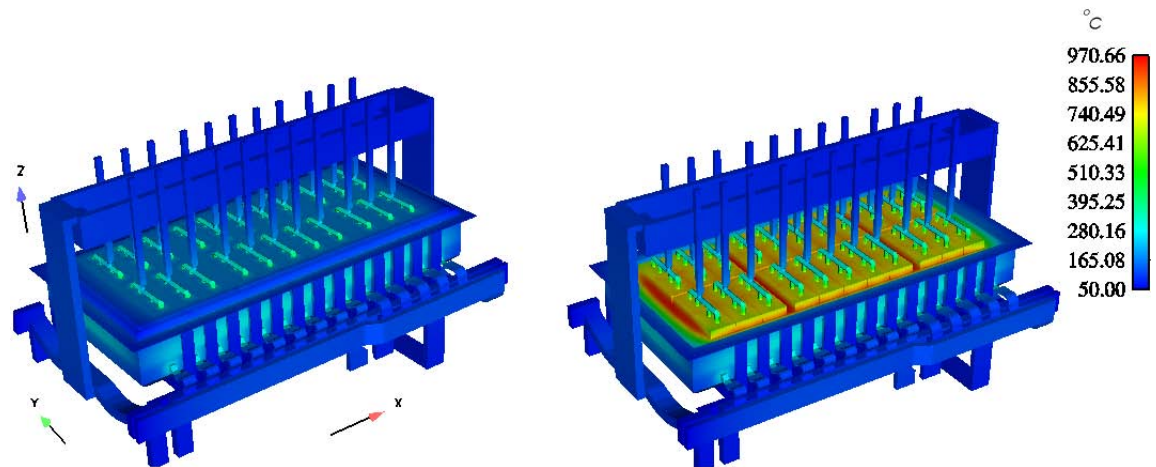


Figure 4.27: la température visualisée dans la cuve avec et sans couverture (Mat. N^0 23, Figure 4.5)

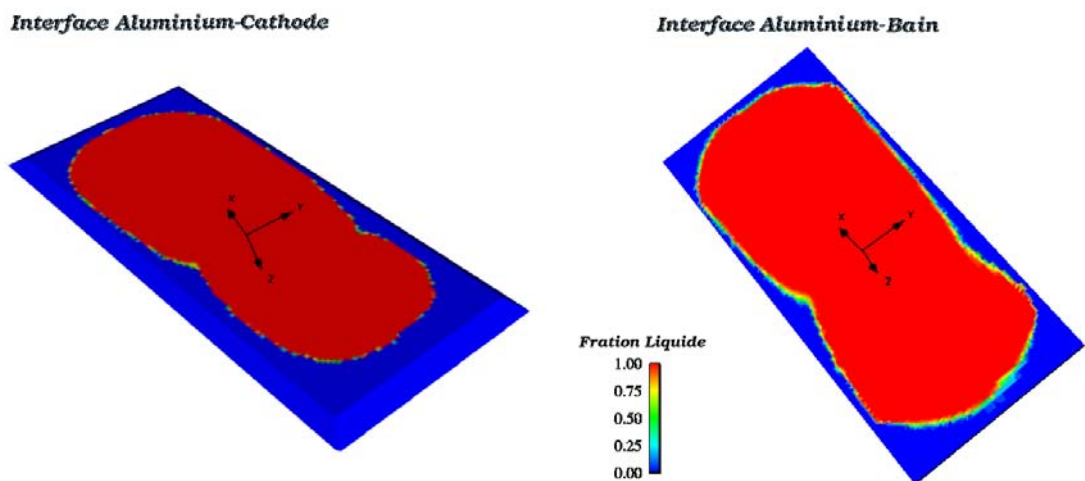


Figure 4.28: Le profil en forme de guitare pour le talus solidifié au niveau des interfaces aluminium-cathode et aluminium-bain

La Figure 4.28 laisse apparaître l'effet convectif de la vitesse dans la configuration du talus solidifié sur le bord de la cuve en prenant la forme d'une "guitare". Dans la Figure 4.29 nous observons la correspondance entre le champ de vitesse et le profil du talus.

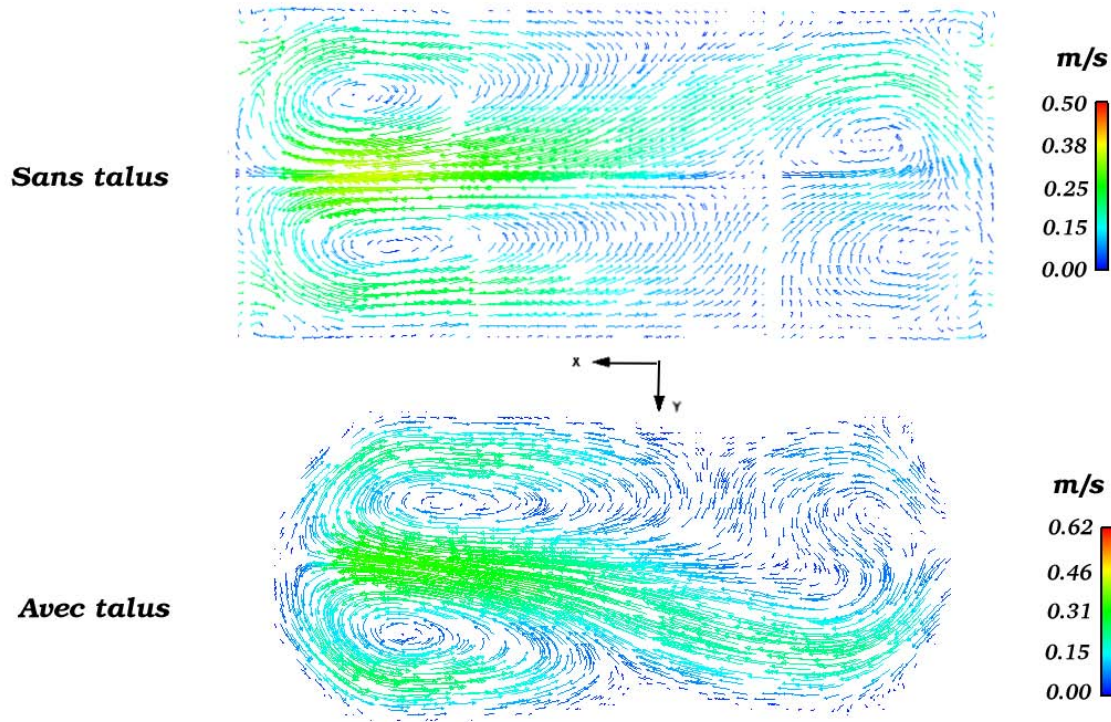


Figure 4.29: Le champ de vitesse au niveau de l'interface bain-métal

Comme dans le calcul électro-thermique, le calcul MHD-Thermique ne présente aucune solidification dans la zone centrale au fond de la cuve. Ceci montre que la formation de "boue" ou "sludge" observée dans l'industrie de l'aluminium, n'est pas un phénomène purement thermique. La présence de celle-ci doit être liée à des phénomènes chimiques et à l'effet Marangoni, effets que nous n'avons pas pris en compte dans notre modèle. Dans le but de mettre en évidence les effets de la solidification sur la forme et l'intensité des lignes de courant électrique, nous calculons, en norme L^1 , dans chacun de matériaux, la différence Δj entre:

- l'intensité du courant électrique provenant d'un calcul électrique dans la cuve sans talus (les domaines 8 et 9 de la Figure 4.5 sont parfaitement liquides),
- l'intensité du courant électrique provenant du calcul MHD-Thermique.

Cette différence est mesurée relativement au courant total I (voir Tableau 4.9)

N°	Matériaux	$\ \Delta j\ _{L^1}$ KA	estimation relative au courant total [%]
8	LIQUID ALUMINIUM	30.206	17.06
9	BATH	1.562	0.88
11	CATHODE BLOCK	19.648	11.10
13	ANODE BLOCK	2.764	1.56
14	RAMMING PASTE	0.332	0.19
15	CASTE IRON (anode studs)	0.082	0.04
16	COLLECTOR BARS	9.827	5.55
17	RAMMING PASTE	1.724	0.97
20	ANODES STUDS (steel)	2.788	1.57
22	ANODES RODS (aluminium)	2.836	1.60
25	BEAM	4.925	2.78
26	ANODES RISER	0.053	0.03
27	ANODES RISER	0.141	0.08
28	RISER (flexes)	0.00	0.00
29	BUSBARS	2.661	1.50
30	BUSBARS	7.679	4.34
31	BUSBARS	4.295	2.43
32	FLEXES	3.837	2.17
33	CONNEXION BARRE CATH-FLEXES	1.155	0.65

Tableau 4.9: effet de la solidification sur le courant électrique.

Comme dans la situation où la vitesse a été supprimée, nous observons que l'effet du champ thermique sur les lignes de courant est plus intense dans la couche de métal.

La puissance thermique totale (Input Heat) est obtenue en sommant toutes les valeurs mentionnées dans le Tableau 4.10. Elle est de l'ordre de 408.50 KWatts.

N°	Matériaux	Calcul MHD-Thermique Joule Dissipation [KWatts]
8	LIQUID ALUMINIUM	0.36
9	BATH	250.23
11	CATHODE BLOCK	8.11
13	ANODE BLOCK	21.47
14	RAMMING PASTE	0.15
15	CASTE IRON (anode studs)	4.03
16	COLLECTOR BARS	15.97
17	RAMMING PASTE	0.61
20	ANODES STUDS (steel)	24.07
22	ANODES RODS (aluminium)	5.74
25	BEAM	5.59
26	ANODES RISER	0.59
27	ANODES RISER	11.37
28	RISER (flexes)	8.44
29	BUSBARS	11.70
30	BUSBARS	10.40
31	BUSBARS	1.00
32	FLEXES	1.87
33	CONNEXION BARRE	26.40

Tableau 4.10: Dissipation par effet Joule obtenue par le calcul MHD-Thermique.

Afin de voir si la conservation énergétique est vérifiée dans notre calcul MHD-Thermique, nous présentons dans le Tableau 4.11 un calcul de la dissipation thermique convective (Output Heat) au bord de la cuve. La valeur totale de l'énergie dissipée par convection est de l'ordre de 398.3 ce qui représente une erreur numérique relative par rapport à la dissipation totale par convection de l'ordre de 2.5 % .

N°	Matériaux	Chaleur dissipée par convection [KWatts]
16	COLLECTOR BARS	13.54
19	STEEL SHELL	153.11
20	ANODES STUDS (steel)	75.28
22	ANODES RODS (aluminium)	15.84
23	ALUMINA COVER	71.40
25	BEAM	8.60
26	ANODES RISER	0.24
27	ANODES RISER	10.43
28	RISER (flexes)	6.50
29	BUSBARS	10.19
30	BUSBARS	10.05
31	BUSBARS	1.39
32	FLEXES	9.71
33	CONNEXION BARRE	12.00

Tableau 4.11: dissipation thermique par convection au bord de la cuve (output Heat), calcul MHD-Thermique

4.2.2 Comparaisons entre les calculs électro-thermique et MHD-Thermique

Afin d’observer l’effet du champ de vitesse sur le profil du talus, nous présentons dans la Figure 4.30 et la Figure 4.31 la fraction liquide provenant de ces deux calculs pour différentes coupes verticales parallèlement au plan “Oyz”. Les sections transversales sont prises aux mêmes endroits pour les deux types de résultats

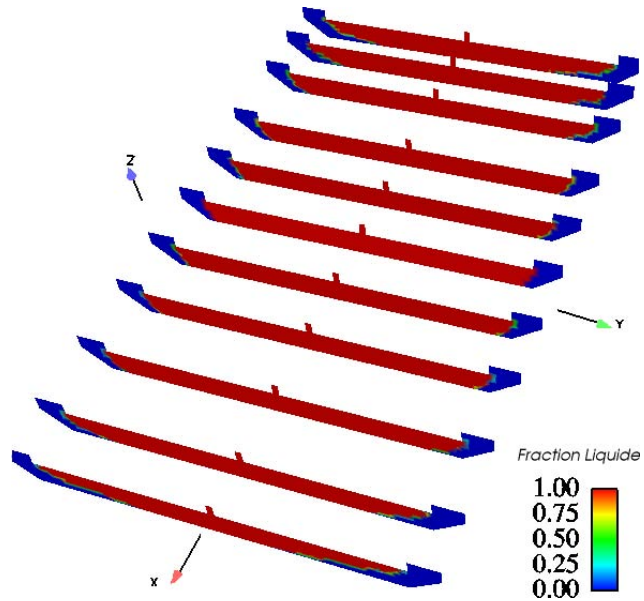


Figure 4.30: fraction liquide obtenue par le calcul électro-thermique

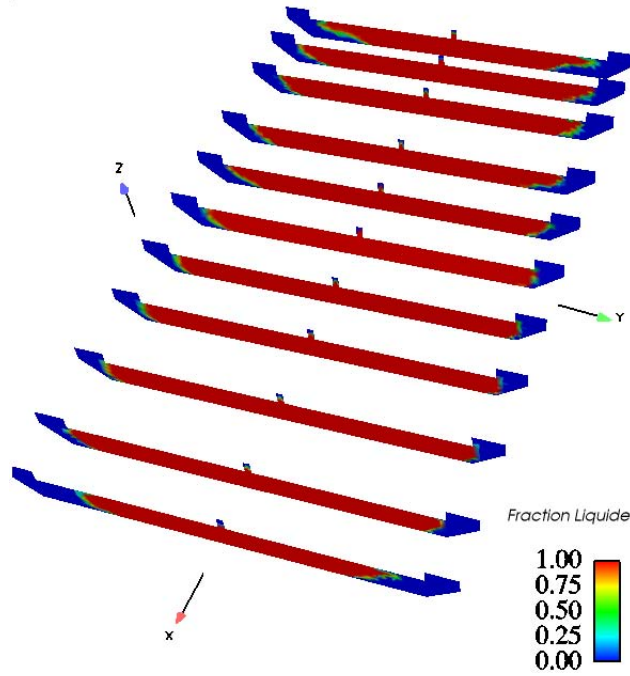


Figure 4.31: fraction liquide obtenue par le calcul MHD-Thermique

Pour comparer ces résultats avec une situation industrielle, nous observons l'épaisseur du talus au niveau de l'interface aluminium-bain. Cette observation est effectuée dans une section transversale prise selon le plan vertical "Oyz" au milieu de la cuve. L'épaisseur du talus obtenue par le calcul électro-thermique est de l'ordre de 15 cm des deux côtés du bain. Dans le cas du calcul MHD-Thermique, nous avons obtenu un talus d'une épaisseur de 12 cm du côté ($y > 0$) et 18 cm du côté ($y < 0$). (voir Figure 4.32)

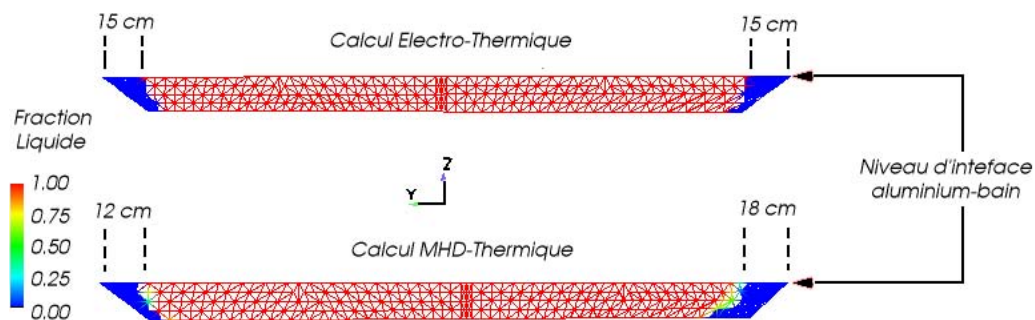


Figure 4.32: l'épaisseur du talus obtenu par le calcul MHD-Thermique et électro-thermique

D'après les mesures expérimentales l' épaisseur du talus au niveau d'interface alumium bain dans le plan "Oyz" est de l'ordre de 16 cm.

D'autre part comme il ressort des observations faites dans l'industrie, la distribution des valeurs de conductivité électrique dans les barres collectrices joue un rôle très important dans l'amélioration du rendement énergétique de la cuve, d'où l'importance de comparer les valeurs de cette conductivité électrique, pour les calculs électro-thermique et MHD-Thermique. (voir Figure 4.33)

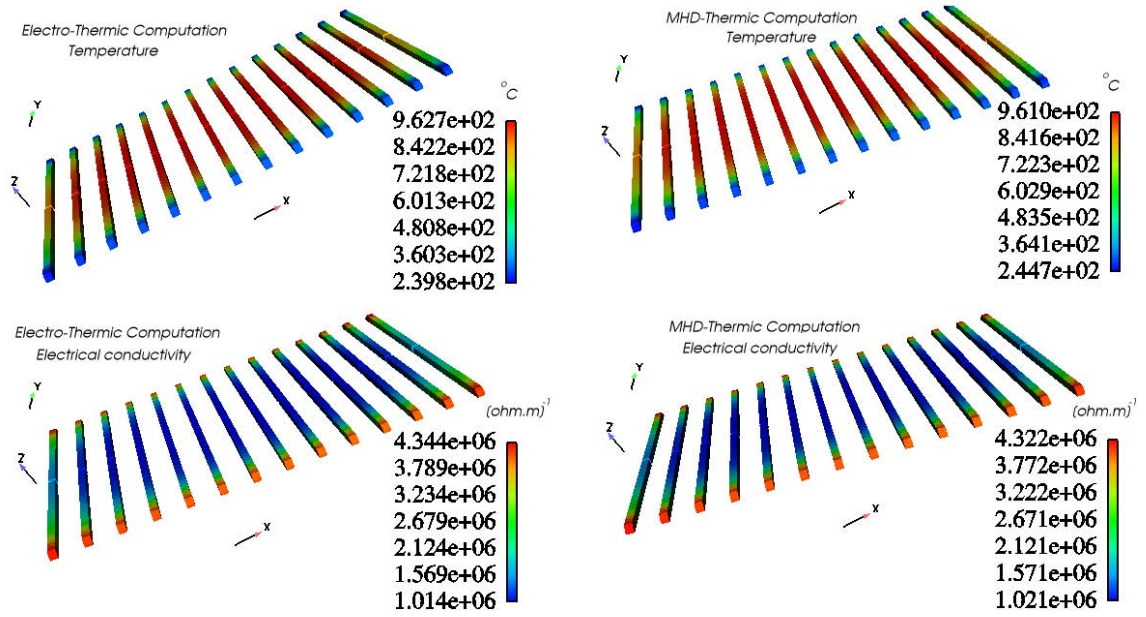
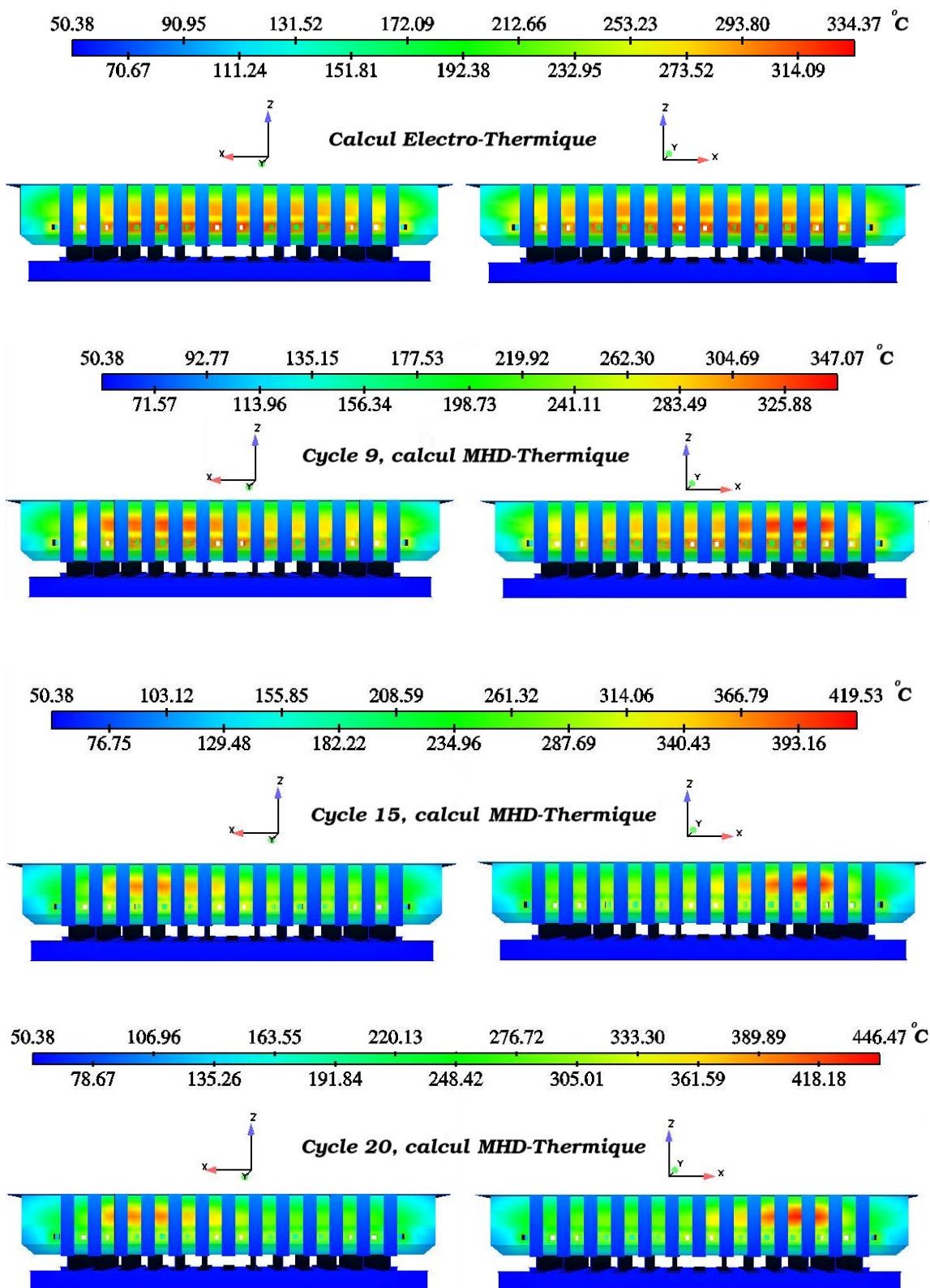


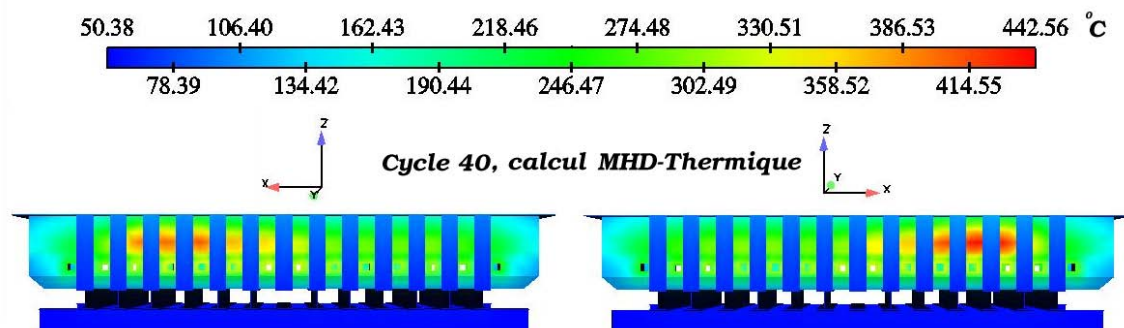
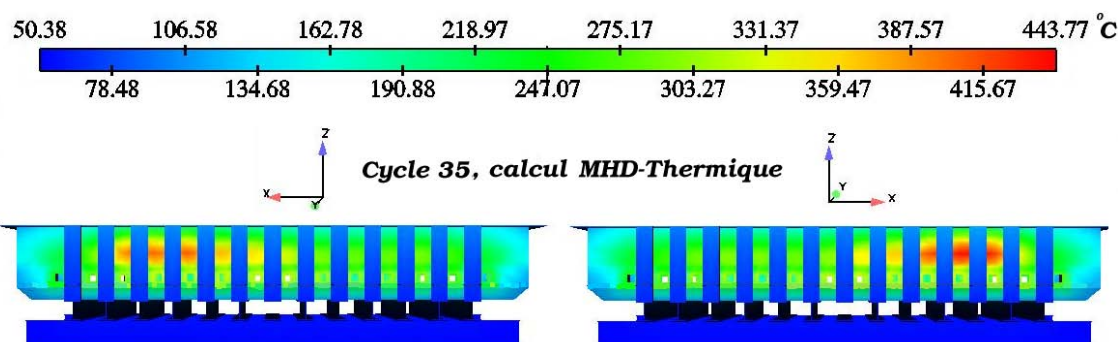
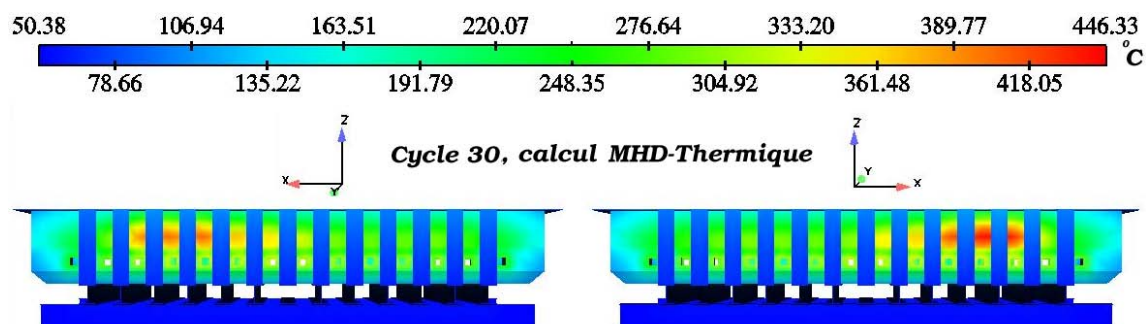
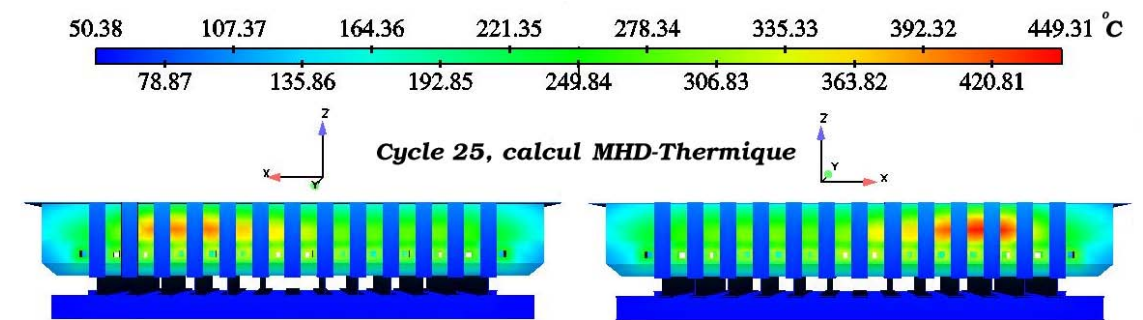
Figure 4.33: les valeurs de la conductivité électrique et de la température dans les barres collectrices

La conductivité électrique dans les barres collectrices est une fonction linéairement décroissante de la température. Ceci justifie le fait que la température représentée dans la Figure 4.33 ait une allure inverse de celle de la conductivité électrique. La différence entre la valeur de la conductivité provenant du calcul électro-thermique avec celle provenant du calcul MHD-Thermique est relativement faible, ce qui correspond à la différence relativement faible entre les deux valeurs de la dissipation par effet Joule provenant de ces deux calculs (voir Tableau 4.7 et 4.10).

4.2.3 Effet de tourbillons hydrodynamiques sur le champ thermique

Comme nous l'avons déjà mentionné la vitesse du fluide modifie la configuration du talus solidifié. Rappelons que le calcul thermique avec vitesse (MHD-Thermique) est initialisé par les valeurs d'enthalpie résultant du calcul sans vitesse (électro-thermique). Afin de mettre en évidence l'effet des tourbillons dans le fluide sur le champ thermique, nous présentons l'évolution de la température sur le caisson au cours des cycles de calcul MHD-thermique:





Il est clair que le profil de la température sur les deux côtés du caisson est symétrique pour les résultats provenant du calcul électro-thermique. Par contre la distribution des valeurs de la température devient de plus en plus asymétrique au cours des cycles de calcul MHD-Thermique. La valeur maximale de la température sur chaque côté du caisson converge vers 380 degrés sur un côté et 443 degrés sur l'autre, ce qui est comparable aux valeurs maximales de température observées par des mesures industrielles.

Chapitre 5

Conclusions et perspectives

Par la nature même du sujet abordé, la rédaction de ce mémoire a souvent un caractère technique. De ce fait il nous a paru opportun de dégager ici les articulations et les résultats principaux puis de mentionner quelques uns des problèmes auquel il pourrait donner lieu. Le présent travail se situe dans le prolongement des études antérieures ([ROS86] et dans [DFR98]) destinées à la dérivation de critères permettant de déterminer le caractère stable ou instable du mouvement des fluides dans une cuve de Hall-Héroult. Dans la référence mentionnée ci-dessus ces critères proviennent d'une analyse en fréquences des équations de la MHD, linéarisées autour d'une solution stationnaire. Il ressort des études numériques effectuées dans [ROS86] et dans [DFR98] que la fiabilité de ces critères repose, pour une large part, sur la précision avec laquelle cette solution stationnaire est obtenue. Par précision nous entendons ici non seulement celle liée à une approche numérique correcte mais également celle relative à l'adéquation entre le modèle et la description des caractéristiques de la cuve. C'est dans cette optique que le modèle introduit décrit non seulement l'hydrodynamique et l'électromagnétique mais également la thermique de la cuve. L'hypothèse selon laquelle densité et viscosité sont indépendantes de la température a néanmoins été conservée de sorte que, à l'exception de la conductivité électrique et de la condition sur la frontière du domaine occupé par les fluides, qui devient ici l'une des inconnues du problème, les équations de la MHD ainsi que les conditions de saut et d'interface, dérivées dans [DFR98], demeurent inchangées. La détermination de cette frontière constitue donc le centre autour duquel ce travail s'articule.

D'un point de vue physique cette frontière est localisée à l'aide de la transition de phase qui prend place entre le talus, qui représente la partie solide, et le bain électrolytique ou l'aluminium qui représente la partie liquide. Mathématiquement la frontière est obtenue par la résolution d'un problème de Stéphan dans lequel le front de solidification tend, au cours d'itérations pseudo-temporelles, vers la solution stationnaire. Dans cette résolution l'équation de la chaleur, considérée en distributions, est formulée en terme de l'enthalpie. On y ajoute une relation qui exprime le lien entre cette fonction thermodynamique et la température. Le terme source de l'équation provient du dégagement de chaleur par effet Joule dû au passage du courant électrique dans les fluides. La frontière est alors identifiée au front de solidification correspondant à l'état stationnaire.

Le champ de vitesse qui entre dans le terme convectif, ainsi que le courant électrique qui donne lieu à l'effet Joule, sont déterminés à l'aide d'un processus itératif. A chaque étape de celui-ci ces deux grandeurs sont obtenues à l'aide du code ALUCCELL, opérant

dans un domaine fluide dont la géométrie est définie par ce front de solidification. De façon plus précise nous avons choisi une résolution itérative pseudo-instationnaire pour le problème thermique, défini dans les variables enthalpie et température, en faisant usage d'un schéma de Chernoff. Il nous paraît important d'insister sur le fait que la résolution numérique obtenue tient compte des interactions entre la MHD et la thermique dans les cuves de Hall-Héroult.

Elle a été appliquée avec succès dans le cas de cuves actuellement utilisées par l'industrie où elle permet de déterminer le profil du talus, donc la forme de la frontière du domaine occupé par les fluides. La forme en "guitare" obtenue met en évidence l'existence de zones plus froides qu'il est possible de mettre en corrélation avec les domaines dans lesquels le champ de vitesse est d'intensité plus faible. Dans ce travail le couplage entre les flux thermiques et la description des fluides dans le cadre de la MHD provient du changement introduit dans la forme des talus et, par voie de conséquence, dans la distribution des courants électriques dans la cuve.

En levant l'hypothèse, moyennant laquelle densité et viscosité sont indépendantes de la température, d'autres couplages, par exemple entre champ de vitesse et champ de température, pourraient être mis en évidence. Dans un prolongement de ce travail il devrait par exemple être possible d'introduire, à l'aide d'une méthode de Boussinesq, les effets liés à la convection thermique.

Un autre prolongement de notre étude concerne l'interface entre bain électrolytique et aluminium, qui est représentée dans notre modèle par un plan horizontal. Puisque, par l'introduction d'un terme de "Carman-Kozeny", le talus solidifié est considéré comme un fluide dont la vitesse est nulle, abandonner cette contrainte, donc considérer cette interface comme une inconnue, reviendrait à résoudre le délicat problème du déplacement de celle-ci, au cours des itérations conduisant à l'état stationnaire, non seulement dans la partie liquide mais également dans la partie solide où la vitesse est nulle.

Le modèle que nous avons traité n'introduit aucun mécanisme permettant de simuler l'évolution des talus sous l'effet des contraintes de cisaillement générées par les fluides en mouvement. Cet effet pourrait donc être pris en compte lors de développements ultérieurs. Il devrait enfin être possible de tenir compte, dans le modèle de la MHD, des changements apportés dans les flux thermiques par l'échappement presque continu du gaz, produit par la réaction de réduction, au voisinage des anodes.

Annexe A

Bibliographie

- [ADa02] M. Adams: Evaluation of three unstructured multigrid methods on 3D finite element problems in solid mechanics, *Int. J. Numer. Methods Engring* 55 (2002) no.5, 519-534.
- [AEF01] J. Thonstad, P. Fellner, G. M. Haarberg, J. Hives, H. Kvande et A. Sterten: Aluminium Eltectrolysis Fundamental of the Hall-Hérlout Process 3rd edition. Aluminium-Verlag 2001.
- [AHM95] N. Ahmad: Numerical simulation of transfert processes in multicomponent systems related to solidification problems. Thèse N° 1349,(1995) É cole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- [AlJ02] A. Janka. Algorithmes multigrilles pour les écoulements compressibles laminaires. Thèse présentée en 2002 à INERIA Sphia Antipolis. (www.inria.fr/rrrt/tu-0711.html)
- [AlJ99] A. Janka. Algebraic Domain Decomposition solver for linear elasticity, *Appl. Math.* 44. 1999, no. 6, 435-458.
- [ASR01] A. Solheim and S. Rolseth Some surface and interfacial phenomena encountered in aluminium electrolysis. *Light Metal* 2001, 469-474. Norway
- [BeAe02] E. Erik and A. Ern, Nonlinear diffusion and discrete maximum principle for stabilized Galerkin approximations of the convection-diffusion-reaction equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 191.: 3833-3855. 2002.
- [Ber95] A. Bermudez et P. Quintela et M.C. Muniz: Existence and uniqueness for a free boundary problem in aluminium cell. *Journal of mathematical analysis and applications* 191, 497-527. 1995.
- [BpWx91] Bramble, J.H; Pasciak. J.E; Wang, J.; Xu, J: Convergence estimates for multigrid algorithms without regularity assumptions, *Math. Comp.* 57, (1991), 23-45.
- [BrH82] A. N.Brooks and T.J.R. Huges Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particlar emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *comp. Meth. App. Mech. Eng.* vol. 32, (1982), 199-259.

- [BrPa93] Bramble, J.H; Pasciak. J.E.: New estimates for multigrid algorithms including the V-cycle, Math. Comp. 60, (1993), 447-471.
- [Brz83] H. Brezis: Analyse fonctionnelle, théorie et applications. Masson, Paris 1983.
- [Car82] J. Carrillo-Menendez et M. Chipot. On the dam problem. J. Diff. Eq. 45, 234-271 (1982).
- [Chi03] M. Chipot et M. C. Muniz. A free boundary problem modelling the electrolysis of aluminium. Appl Math Optim 47:231-252 (2003)
- [Cla94] S. Clain: Analyse mathématique et numérique d'un modèle de chauffage par induction. Thèse N° 1240 (1994). Section de mathématiques, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- [COM03] M. Dupuis, V. Bojarevics et J. Freiberg: Demonstration thermo-electric and MHD mathematical models of a 500 kA Al electrolysis cell. COM 2003 (42nd Conference of Metallurgists), Vancouver, Canada.
- [DFR98] J. Descloux, M. Flueck et M. V. Romero: A modelling of the stability of aluminium electrolysis cells. Nonlinear partial differential equations and their applications. Collège de France. Seminar Volume XIII, Pitman Research Notes in Mathematics Series 391, 1998.
- [FFH92] L. P. Franca, S. L. Frey and T. J. R. Hughes: Stabilized finite element methods: I. Application to the advective- diffusive model, comp. Meth. App. Mech. Eng. vol. 95, (1992), 253-276.
- [Gre91] P. A. Gremaud: Analyse numérique de problème de changements de phase liés à des phénomènes de solidification. Thèse N° 941 (1991). Section de mathématiques, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- [Grög89] K. Gröger: A $W^{1,p}$ -Estimate for solutions to mixed boundary value problems for second order elliptic differential equations. Mathematische Annalen. 283, 679-687 (1989).
- [GrW87] K. Grjotheim and B. J. Welch: Aluminium Smelter technology: a pure and applied approach. Aluminium-Verlag, cop, 1988.
- [KGH86] K. Grjotheim and H. Kvande: Understanding the Hall- Hérlout Process for Production of Aluminium. Aluminium-Verlag, Dusseldorf, 1986.
- [Kra64] M. A. Krasnoselskii. Topological methods in the theory of nonlinear integral equations. International Series of Monographs in pure and applied Mathematics, Pergamon Press, 1964.
- [Lad68] O. A. Ladyzenskaja, V. A. Solonnikov et N. N. Uralceva: Linear and quasi-linear equations of parabolic type. American mathematical society providence, rhode island 1968.
- [Mas03] A. Masserey: Optimisation et simulation numérique du chauffage par induction pour le procédé de thixoformage. Thèse N° 2740,(2003) École Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- [MDUP97] M. Dupuis (Génisim): Process Simulation. TMS Course on Industrial Aluminium Electrolysis, 1997.

- [MMz95] Maria del Carmen Muniz Castineira: Estudio matematico de un problema de Stefan relacionado con la modelizacion termoelectrica de cubas de electrolisis de aluminio. Universidade de Santiago de Compostela, Teses Num 489, 1995.
- [MuC03] M. C. Muniz et L. Consiglieri: Existence of solution for a free boundary problem in the thermoelectrical modelling of an alumnium electrolytic cell. Euro. Journal of Applied Mathematics 2003, vol 14, pp. 201 - 216.
- [Par98] C. Parietti. Modélisation Mathématique et analyse numérique d'un problème de chauffage électromagnétique. Thèse N° 1838,(1998). Section de mathématiques, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- [RaT98] P. A. Raviart and J. M. Thomas: Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles. Dunod, Mathématiques appliquées pour la maîtrise. edition, 1998.
- [Rav83] P. A. Raviart, J. M. Thomas: Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles. Masson, Paris 1983.
- [ROS86] M. V. Romerio and M. A. Secretan: Magnetohydrodynamic equilibrium in aluminium electrolytic cells. Computer Physics Reports. Volume 3 June II 1986.
- [RPE02] R. Pelletier: Gel des solutions concentrées en milieux poreux et application au procédé Hall-Héroult. Thèse présentée au département de génie physique, École polytechnique de Montréal. Janvier 2002.
- [SHD87] S. H. Davis: Thermocapillary instabilities. Ann Rev. Fluid Mech. 19: 403-435, 1987.
- [Tre85] V. A. Trenogin: Analyse fonctionnelle, Editions Mir, Moscou, 1985.
- [VEAJ98] V. A. Khokhlov, E. S. Filatov, A. Solheim and J. Thonstad: Thermal conductivity in cryolitic melts-new data and its influence on heat transfer in aluminium cells. Light metal 1998, 501-506.
- [VMB96] P. Vanek, J. Mande and M. Brezina: Algebraic multigrid by smoothed aggregation for second and fourth order elliptic problems. Computing 56,170-196. 1996.
- [YSA96] Y. Saad: Iterative methods for sparse linear systems, PWS publishing, Boston 1996.

Annexe B

Principales notations utilisées

1. Notations liées à l'électromagnétisme:

- b Tesla : Induction magnétique.
- j Am^{-3} : Densité volumique de courant.
- e Vm : Champ électrique.
- μ_0 $V s A^{-1}m^{-1}$: Perméabilité dans le vide.
- σ $(ohm m)^{-1}$: Conductivité électrique dans un conducteur.
- ϕ Volts : Potentiel électrique.

2. Notations liées à l'hydrodynamique:

- u m/s : Vitesse de fluide.
- p N/m^2 : Pression de fluide.
- Γ : Interface aluminium-bain.
- ψ N/m^2 : Saut de contraintes hydrodynamiques normales à l'interface Γ .
- μ : Viscosité
- ρ Kg/m^3 : Densité volumique (aluminium: $2270 Kg/m^3$; bain: $2130 Kg/m^3$).

3. Notations liées à la thermique:

- θ $^{\circ}C$: Température.
- H KJ/m^3 : Enthalpie volumique.
- C_p $KJ/Kg^{\circ}C$: Chaleur spécifique.
- ℓ KJ/m^3 : Chaleur latente de fusion par unité de volume.
- k $KW/m^{\circ}C$: Chaleur latente.
- α $KW/m^2^{\circ}C$: Coefficient de convection thermique.
- f_s : Fraction solide.

Curriculum Vitae

Originaire de Liban, je suis né le 14 novembre 1973 à Mayfadoune “Liban sud”. J’ai effectué ma scolarité primaire et secondaire sur mon lieu d’origine. J’ai ensuite poursuivi mes études à l’Université Libanaise à Beyrouth, où j’ai obtenu en 1998 le diplôme d’ingénieur civil avec orientation vers le stockage de déchets radioactifs en collaboration avec l’Ecole des mines à Nancy France. J’ai occupé jusqu’à l’année 2000 un poste d’ingénierie civile dans une entreprise à Beyrouth. J’ai en même temps, obtenu le diplôme d’études approfondies DEA en modélisation et calcul intensif établi en partenariat avec l’Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne EPFL. Depuis mars 2001, je suis assistant doctorant dans l’institut d’analyse et calcul scientifique à la section de mathématiques de l’EPFL, mon travail est consacré à l’étude thermique dans une cuve d’électrolyse d’aluminium en collaboration avec l’industrie Alcan.